



UNIVERSIDAD CARLOS III DE MADRID

ESCUELA POLITÉCNICA SUPERIOR

INGENIERÍA INDUSTRIAL

PROYECTO FINAL DE CARRERA

ESTUDIO NUMÉRICO DEL MEZCLADO EN UN LECHO FLUIDIZADO BIDIMENSIONAL.

Autor:

Ricardo Campollo Muelas

Tutores:

Fernando Hernández Jiménez

Eduardo Cano Pleite

DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA TÉRMICA Y DE FLUIDOS

Leganés, Madrid, 2015

DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA TÉRMICA Y DE FLUIDOS

PROYECTO FINAL DE CARRERA

**ESTUDIO NUMÉRICO DEL MEZCLADO EN UN
LECHO FLUIDIZADO BIDIMENSIONAL.**

Autor:

Ricardo Campollo Muelas

Tutores:

Fernando Hernández Jiménez

Eduardo Cano Pleite

Leganés, Madrid, 2015

INDICE

INDICE.....	iii
Lista de figuras.....	vi
Lista de tablas.....	ix
Agradecimientos.....	xi
Resumen.....	xiii
Abstract	xv
1. INTRODUCCIÓN.....	1
1.1.OBJETIVO Y ALCANCE	2
1.2. ESTRUCTURA DE LA MEMORIA	3
2. CONCEPTOS DE FLUIDIZACIÓN.	4
2.1.EL FENÓMENO DE FLUIDIZACIÓN	5
2.2.COMPORTAMIENTO FLUIDO DE UN LECHO FLUIDIZADO	8
2.3.VENTAJAS Y DESVENTAJAS DE LOS LECHOS FLUIDIZADOS PARA APLICACIONES INDUSTRIALES	9
2.4.CALIDAD DE FLUIDIZACIÓN	10
2.5.CLASIFICACIÓN DE LAS PARTÍCULAS DE FLUIDIZACIÓN	10
2.6.CÁLCULO DE PÉRDIDA DE CARGA DEL LECHO Y VELOCIDAD DE MÍNIMA FLUIDIZACIÓN.....	12
2.7.APLICACIONES INDUSTRIALES DE LA FLUIDIZACIÓN.....	14
2.8.MEZCLADO Y SEGREGACIÓN	16
2.9.Modelización numérica de lechos fluidizados	24
3. SIMULACIÓN Y POSTPROCESADO	27
3.1.SIMULACIÓN	28
3.2.POSTPROCESADO	33
4. RESULTADOS	36
5. CONCLUSIONES Y TRABAJOS FUTUROS	50
APENDICES.....	53
A ECUACIONES DE GOBIERNO Y MODELOS	53
A1 ECUACIONES DE GOBIERNO	53
A2 Estrés por fricción.....	54

A3	INTERCAMBIO DE MOMENTO EN LA INTERFASE	55
A4	TEORÍA CINÉTICA.....	55
B	ARCHIVO DE ENTRADA MFIX	58
C	CÓDIGO MATLAB	67
BIBLIOGRAFÍA.....		71

Lista de figuras

Figura 2.1. Distintos modos de contacto entre el lecho de partículas y el fluido	6
Figura 2.2. Ejemplos de lecho fluidizado circulante	7
Figura 2.3. Lecho de chorro (Spouted bed).....	7
Figura 2.4. Comportamiento fluido de un lecho de partículas fluidizado	8
Figura 2.5. Clasificación de Geldart de partículas	11
Figura 2.6. Curva Perdida de carga-Velocidad para sistemas tipo gas-sólido	12
Figura 2.7. Mecanismos de segregación	17
Figura 2.8. Mecanismos de segregación; ‘Brazil-nut effect’	18
Figura 2.9. Muestra del arrastre de sólidos de mayor tamaño o densidad producido por una burbuja al ascender	18
Figura 2.10. Mecanismos de mezclado de sólidos	19
Figura 2.11. Modelo para el mecanismo de intercambio de sólidos entre el flujo descendente de sólidos y los que fluyen hacia arriba junto con las estela.....	20
Figura 2.12. Distribución segregación de sólidos en mezclas binarias.....	21
Figura 2.13. Segregación vertical de sólidos comerciales	21
Figura 2.14. Tipos de mezclas.....	22
Figura 2.15. Situación inicial del experimento	24
Figura 2.16: Diferentes modelos de modelización numérica de lechos fluidizados	24
Figura 2.17: Comportamiento mecánico de contactos partícula-partícula en los sistemas DEM	25
Figura 3.1. Zoom al mallado de la zona inferior	30
Figura 3.2. Mallado completo del modelo numérico	30
Figura 3.3. Modificación condición inicial	32
Figura 4.1. Captura de la simulación. $t=0$ s.....	37
Figura 4.2. Captura simulación. $t=0,02$ s	38
Figura 4.3. Captura simulación $t=0,25$ segundos	38
Figura 4.4. Captura simulación $t=0,5$ segundos	38
Figura 4.5. Captura simulación $t=1$ segundos	39
Figura 4.6. Captura simulación $t=1,5$ segundos	39
Figura 4.7. Captura simulación $t=2,5$ segundos	39

Figura 4.8. Captura simulación $t=5$ segundos	40
Figura 4.9. Captura simulación $t=10$ segundos	40
Figura 4.10. Tiempo de mezclado en función del tiempo para las simulaciones de las partículas de $d_p = 0,5\text{mm}$ y $U=2U_{mf}$	41
Figura 4.11. Capturas de las simulaciones en MFiX, $t=4,65\text{ s}$, $t=6,12\text{ s}$ y $t=7,18\text{ s}$. Partículas de $d_p = 0,5\text{ mm}$ y $U=2U_{mf}$	42
Figura 4.12. Evolución del IM para partículas de $d_p = 0,5\text{mm}$ y $V=2V_{mf}$	44
Figura 4.13. Variación de tiempo de mezclado de partículas $d_p = 0,5\text{ mm}$ en función de la velocidad superficial	45
Figura 4.14. Variación de tiempo de mezclado de partículas $d_p = 0,7\text{mm}$ en función de la velocidad superficial	45
Figura 4.15. Variación de tiempo de mezclado de partículas $d_p = 1,15\text{mm}$ en función de la velocidad superficial	46
Figura 4.16. Tiempos de mezclado de los tres tipos de partículas en función de las velocidades de fluidización	47
Figura 4.17. Tiempos de mezclado de los tres tipos de partículas en función de las velocidades de fluidización obtenidos de forma experimental	48

Lista de tablas

Tabla 1. Índices de Mezclado 23

Tabla 2. Casos de simulación 28

Tabla 3. Propiedades de las partículas. 29

Tabla 4. Set-up de la simulación..... 31

Tabla 5. Tabla Resultados 47

Agradecimientos

En primer lugar, quiero agradecer a mis dos tutores, Eduardo Cano y Fernando Hernández, el apoyo y ayuda prestada durante estos meses para la realización de este proyecto.

Quiero dar las gracias a Carmen por su apoyo incondicional, por su paciencia y comprensión durante este tiempo.

También agradecer a mis padres y mi hermano el apoyo prestado durante la carrera, pero sobre todo agradecer a mi abuela, con la que he vivido durante la mayor parte de este tiempo, todo su apoyo y cuidados que me ha dado.

Agradecer a todos mis amigos, tanto de la Universidad como del colegio, por siempre estar ahí y darme su apoyo, pero en especial agradecer a mi gran amigo Mordisquitos por su gran ayuda y dedicación.

Muchas gracias a todos.

Resumen

La fluidización es un proceso por el cual un grupo de partículas sólidas se comporta como un fluido cuando un gas o líquido las atraviesa. El estudio y comprensión de la fluidización y del proceso de mezclado es muy importante para muchos procesos industriales. Aunque se han realizado muchos estudios sobre diferentes fenómenos durante el proceso de fluidización, todavía sigue existiendo una necesidad de comprender con profundidad los diferentes fenómenos que ocurren durante esta, en particular en el proceso de mezclado, de ahí la realización de este trabajo.

El presente trabajo se centra en el estudio de simulación numérica del proceso de mezclado en un lecho fluidizado bidimensional (2D). Para ello se utilizó el programa de código abierto MFIX para resolver las ecuaciones constitutivas del modelo de dos fluidos (Euler-Euler), mediante el cual se tratan tanto las fases sólidas como la fase gas como dos medios continuos. Posteriormente se empleó el programa Matlab para el postproceso de los resultados.

Se estudió la influencia que tienen la velocidad superficial y el tamaño de las partículas en el tiempo de mezclado del lecho. Y se compararon los resultados obtenidos en las simulaciones con los resultados obtenidos de forma experimental en un lecho de iguales características, ya realizados en un trabajo previo.

Por tanto, en este proyecto se estudia el tiempo de mezclado obtenido de simulaciones numéricas para tres tamaños de partículas distintas, sometiendo cada partícula a tres velocidades de fluidización diferentes. Los resultados muestran que en los tres casos al aumentar la velocidad del gas el tiempo de mezclado disminuye. Por otro lado, de entre los tres tipos de partícula estudiados, aquellas de un tamaño intermedio muestran tiempos de mezclado menores, mientras que la tendencia de los otros dos tipos de partículas presenta un comportamiento más complejo. Los resultados obtenidos de la simulación muestran una tendencia similar a los resultados experimentales con los que se ha comparado.

Abstract

Fluidization is a process in which solid particles behave like a fluid when a gas or liquid passes through them. Studying and understanding the fluidization and mixing processes is very important for many industrial processes. Although many researches about different phenomena during fluidization process have been done, there still remains a need of a deeper understanding of the different phenomena involved, in particular in the mixing process. Hence the importance of the following work.

The present research project focuses on the numerical simulation study of the mixing process in a two-dimensional fluidized bed (2D). In order to do this, the open source code MFIX has been used to solve the constitutive equations of the two-fluid model (Euler-Euler) through which solid and gas phases are treated as two continuous mediums. Subsequently, Matlab software has been used for the post processing of the results.

The influence of both the gas superficial velocity and the size of the particles in the mixing time has been studied. Moreover, the results of the simulations have been compared with the ones obtained experimentally in a previous work in a bed of the same characteristics.

Therefore, in this research project, the mixing time for three different sizes of particles is studied, in which each particle is subjected to three different fluidization speeds.

The results show, in all three cases, that increasing the gas velocity reduces the mixing time. On the other hand, among the three types of particles under study, the intermediate size particles show a shortest mixing time while the trend of the other two types of particles has a more complex behavior. The simulation results are in agreement with the trend shown by the experimental results.

1. INTRODUCCIÓN

1.1. OBJETIVO Y ALCANCE

La fluidización es una operación por la cual partículas sólidas se comportan como un fluido debido a su suspensión por un gas o un líquido. A nivel industrial, la primera aplicación de importancia de la fluidización tuvo lugar en los años 40, con los procesos de craqueo catalítico [1] y, desde entonces, se ha empleado en diferentes áreas, expandiendo su utilización a una gran variedad de procesos. A lo largo de su historia y dada su complejidad, el estudio de la fluidización no ha sido sencillo, resultando complicado establecer teorías y acerca de su comportamiento. Muchos de los estudios se han llevado a cabo a pequeña escala y su comportamiento no es siempre posible extrapolarlo a procesos a mayor escala.

El principal objetivo de este proyecto es analizar numéricamente, usando un modelo Euler-Euler (modelo de dos fluidos, TFM), el mezclado de un lecho fluidizado bidimensional y comparar los resultados obtenidos en la simulación con los resultados experimentales ya realizados en un lecho pseudo-bidimensional (pseudo-2D) [2]. Para ello se estudiará en el modelo numérico el tiempo de mezclado de un lecho que contiene dos fases de partículas claramente diferenciadas. En los experimentos realizados con anterioridad [2], cada una de las fases contiene partículas de igual densidad y diámetro, haciéndolas así claramente diferenciables a efectos de análisis digital de imágenes (DIA). Dada la naturaleza computacional del presente proyecto, pueden obtenerse una gran variedad de resultados de las simulaciones. De este modo, se estudiará la influencia que tienen la velocidad superficial y el tamaño de las partículas en el tiempo de mezclado.

Para la obtención de los resultados se utilizarán dos programas. El primero de ellos será el código libre MFIX (Multiphase Flow with Interphase eXchanges), con el que se realizarán las simulaciones y proporcionará los datos necesarios para la obtención de resultados inicialmente cualitativos. Tras realizar un postprocesado de la simulación, con el programa Matlab, se implementará un script con el que se calcularán los tiempos de mezclado para cada uno de los casos estudiados.

Se define el tiempo de mezclado como el tiempo necesario para alcanzar una mezcla homogénea para el conjunto de partículas que han sido fluidizadas. Para calcular los tiempos de mezclado se utilizarán varios modelos de índices de mezclado, los cuales nos dan información sobre el porcentaje de mezclado en nuestro modelo numérico.

Se realizarán simulaciones bidimensionales (2D) basadas en los experimentos realizados en el lecho pseudo-2D presente en el Departamento de Ingeniería Térmica y de Fluidos de la Universidad Carlos III de Madrid. Este tipo de lechos es de vital importancia para comprender la dinámica de los sistemas gas-partículas. Los lechos pseudo-2D tienen un espesor muy fino y poseen un cristal transparente que permite una buena visualización del sistema, la cual puede considerarse representativa del mismo. Sin embargo, hay que tener en cuenta que las paredes delantera y trasera restringen el movimiento de los sólidos, por lo que el comportamiento puede variar en comparación con sistemas puramente tridimensionales (3D).

Se va a realizar el estudio de simulación para tres tipos de partículas, todas ellas de la misma densidad ($\rho_p = 2500 \text{ kg/m}^3$), pero de diferentes diámetros ($d_{p1} = 0,5 \text{ mm}$ $d_{p2} =$

0,7 mm, $d_{p3} = 1,15$ mm). Por cada tipo de partícula se realizarán tres simulaciones a diferentes velocidades superficiales ($2U_{mf}$, $2,5U_{mf}$, $3U_{mf}$).

1.2. ESTRUCTURA DE LA MEMORIA

Este proyecto está compuesto por cinco capítulos más un apéndice y la bibliografía.

El primer capítulo es la introducción, donde se describen cuáles son los objetivos del proyecto y su alcance.

El segundo capítulo se centra en los principios básicos de la fluidización. De forma resumida se explicará el fenómeno de la fluidización y sus principales características, prestando especial atención a los procesos de mezclado y de segregación. En este capítulo también se definirá el índice de mezclado, repasando los diferentes índices existentes y desarrollando el que se utilizará en este estudio. Por último, se hace una breve descripción de los diferentes tipos de modelización numérica típicamente utilizados en la simulación de lechos fluidizados.

El tercer capítulo explica el proceso de simulación y postprocesado de los datos. En este apartado también se hará una breve descripción de las características del lecho y de las partículas que lo forman.

El cuarto capítulo se presenta los resultados obtenidos en las diferentes simulaciones. Se analiza la influencia que tienen tanto la velocidad del gas que atraviesa el lecho como el diámetro de las partículas empleadas sobre el tiempo de mezclado de un lecho fluidizado.

En el quinto capítulo se exponen las conclusiones resultantes de la realización del proyecto y se proponen posibles futuros trabajos.

Además existen tres apartados Apéndices y la bibliografía utilizada para la realización del proyecto.

En el Apéndice A se incluyen las ecuaciones constitutivas y de cierre del modelo que utiliza el programa MFIX para resolver la simulación. En el Apéndice B se incluye el código de entrada que necesita MFIX para la simulación del lecho fluidizado. Y por último el Apéndice C, el cual recoge el script empleado en Matlab para el postproceso de los resultados de la simulación.

2. CONCEPTOS DE FLUIDIZACIÓN.

En este primer capítulo se describirá el fenómeno de fluidización, donde se definirán las principales características del comportamiento de un lecho fluido, así como los diferentes regímenes de fluidización posibles y los tipos de materiales típicamente empleados en fluidización.

Existen dos tipos de fluidización en función de los fluidos empleados en la misma, líquidos y gases, fluidización sólido-gas y fluidización sólido-líquido. En este proyecto se realizarán simulaciones de mezclado en lechos fluidizados con gas, por lo que, de aquí adelante, sólo se hará alusión a la fluidización sólido-gas.

2.1. EL FENÓMENO DE FLUIDIZACIÓN

Cuando hacemos pasar un fluido verticalmente a través de un lecho, a una velocidad del flujo (generalmente denominada velocidad superficial, U_0) baja, el fluido simplemente se filtrará a través de los espacios vacíos que existen entre las partículas de los sólidos, en este caso, estaremos ante un lecho fijo. Si se sigue aumentando la velocidad superficial, las partículas se separan y empiezan a vibrar y moverse en regiones restringidas, a esto se le denomina lecho expandido, Figura 2.1(a).

Con un aumento aún mayor de la velocidad del flujo se alcanza un punto donde todas las partículas están suspendidas por el gas que fluye verticalmente. En este punto, las fuerzas de fricción entre las partículas y el fluido solo es contrarrestada por el peso de las partículas, las componentes verticales de las fuerzas de compresión entre las partículas adyacentes desaparecen. Esta velocidad es denominada velocidad de mínima fluidización (U_{mf}), Figura 2.1(b). A velocidades mayores de fluidización conducen a una expansión del lecho, pudiéndose dar una fluidización homogénea, Figura 2.1(c). En estas condiciones de mínima fluidización, el medio granular adquiere comportamientos similares a los de un fluido.

Cuando se aumenta el flujo más allá de la velocidad de mínima fluidización se observan grandes inestabilidades con burbujeos y la canalización del gas. A velocidades de flujo aún más altas, la agitación se vuelve más violenta y el movimiento de los sólidos se hace más vigoroso. El lecho se expande mucho más allá de su volumen de mínima fluidización y aparecen grandes vacíos similares a burbujas en medios líquido-gas, a este régimen se le denomina lecho fluidizado burbujeante, ver Figura 2.1(d). En este caso pueden distinguirse claramente dos fases distintas, la fase gas en forma de burbujas y el conjunto de sólidos o fase densa.

Las burbujas pueden coalescer y crecer a medida que van ascendiendo por el lecho, y, eventualmente, pueden ser lo suficientemente grandes como para poder ocupar todo el ancho del lecho. Si se tratan de partículas pequeñas, estas fluyen hacia abajo en las proximidades a la pared, alrededor de las burbujas de gas que ascienden atravesando el lecho, Figura 2.1(e). Si las partículas son más grandes, las partículas del lecho que quedan por debajo de la burbuja son empujadas como un pistón. Las partículas se reintegran al lecho porque “llueven” a través de las burbujas de gas, Figura 2.1(f)

Cuando el lecho se fluidiza a una velocidad superficial suficientemente alta, se supera la velocidad terminal de los sólidos, la superficie superior del lecho desaparece y en lugar de burbujas, se observa un movimiento turbulento de los sólidos y vacíos de gas de varios tamaños y formas. A este estado se le denomina lecho fluidizado turbulento Figura 2.1(g).

Por último, para velocidades suficientemente altas, la velocidad se aumenta aún más, los sólidos son arrastrados fuera del lecho, y existe un transporte neumático de los sólidos (ver Figura 2.1(h)).

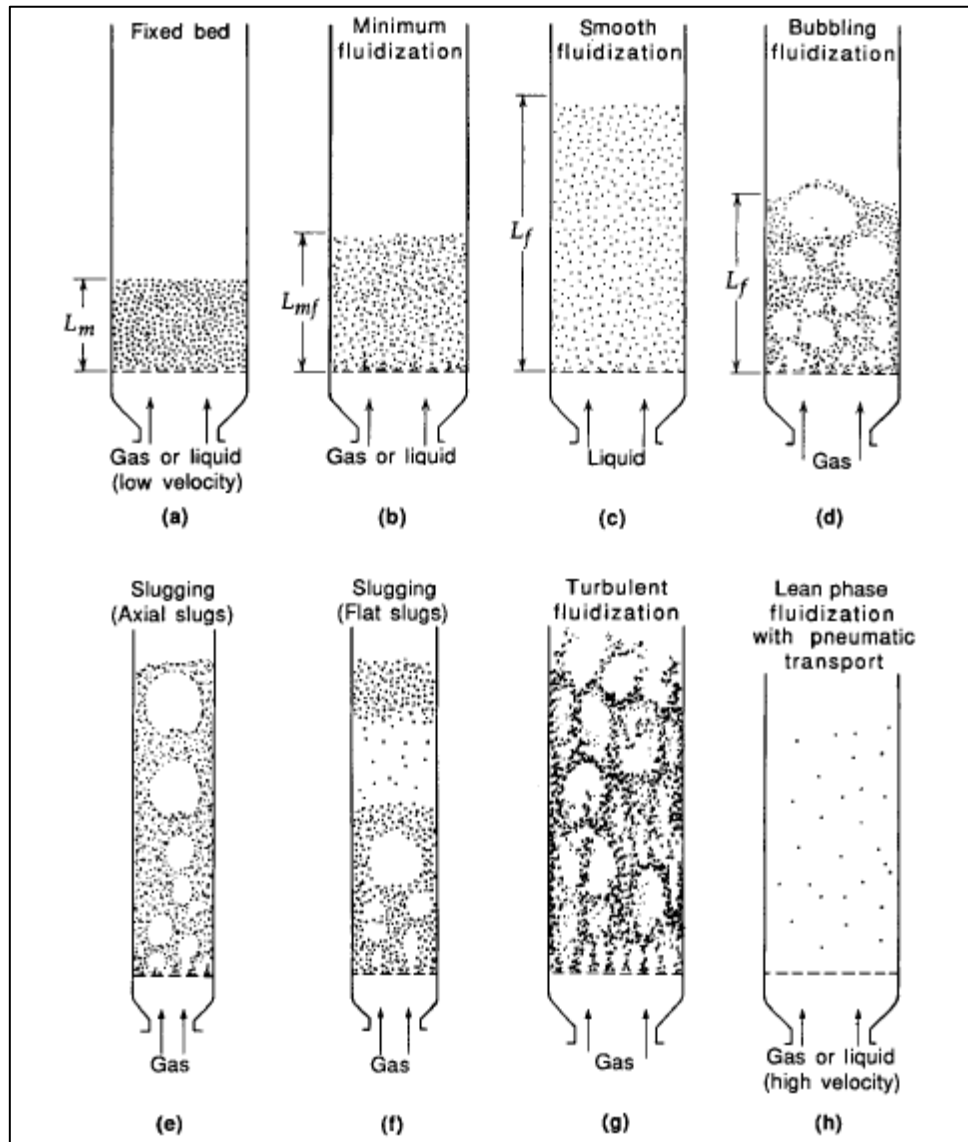


Figura 2.1. Distintos modos de contacto entre el lecho de partículas y el fluido: (a) Lecho fijo; (b) Lecho en comienzo de fluidización; (c) Lecho con fluidización no burbujeante; (d) Lecho con fluidización burbujeante; (e) Slugging con slugs axiales; (f) Slugging con slugs de pared; (g) Fluidización turbulenta; (h) Fluidización en fase dispersa con transporte neumático de partículas.[1]

Tanto en el régimen turbulento como en el de transporte neumático, grandes cantidades de partículas pueden ser arrastradas fuera del lecho. Para recuperar dichas partículas y devolverlas de nuevo al interior del lecho se emplean ciclones (Figura 2.2). Los ciclones son elementos de sedimentación por fuerza centrífuga. En los lechos fluidizados

turbulentos con arrastre de partículas moderado se suelen utilizar ciclones internos (Figura 2.2(a)) y en los lechos de fase dispersa donde el arrastre es mayor se emplean grandes ciclones fuera del lecho (Figura 2.2(b)). Los sistemas que emplean ciclones para la recuperación de partículas son denominados lechos fluidizados circulantes.

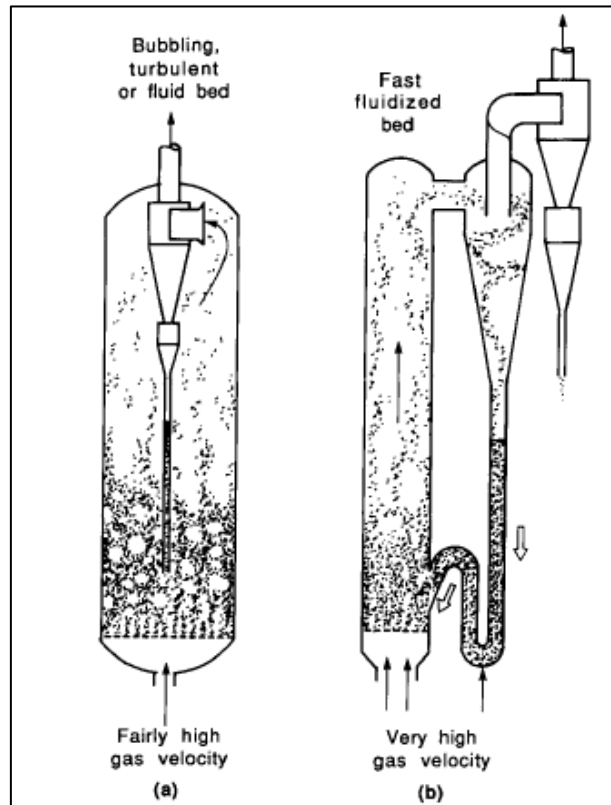


Figura 2.2. Ejemplos de lecho fluidizado circulante: (a) Lecho fluidizado turbulento con ciclón interno; (b) Lecho fluidizado de fase dispersa con ciclón externo. [1]

Otro fenómeno que puede ocurrir es un chorro de gas que atraviesa el lecho a su paso. A este fenómeno se le denomina spouted bed (Figura 2.3). Si la velocidad del gas es alta, éste penetra a través del lecho arrastrando tras de sí partículas hasta la parte superior del lecho y el resto de partículas caen alrededor del chorro hacia las paredes.



Figura 2.3. Lecho de chorro (Spouted bed). [1]

2.2. COMPORTAMIENTO FLUIDO DE UN LECHO FLUIDIZADO

Un lecho de partículas fluidizado con gas se asemeja mucho a un líquido en estado de ebullición y muestra un comportamiento similar al de un fluido. Por ejemplo, si un objeto de gran tamaño y con menor densidad que la de la fase densa del lecho se sumerge en este, cuando el lecho se encuentre fluidizado, se libera este ascenderá hasta la superficie y flotará sobre el lecho de manera similar a como lo haría sobre un líquido de mayor densidad relativa. Al contrario, si posamos un objeto de mayor densidad que la de la fase densa del lecho e inyectamos gas a una velocidad suficiente, el objeto se sumergirá rápidamente. Figura.2.4(a).

Otro ejemplo de comportamiento del lecho fluidizado como un fluido tiene lugar cuando se inclina el recipiente que lo contiene. Al, al igual que sucede con un líquido, la superficie superior de la cama permanece horizontal cuando lo inclinamos. Figura 2.4(b).

Cuando realizamos un agujero en el recipiente que contiene al lecho fluidizado, al igual que pasaría con un líquido, este sale en forma de chorro. Figura 2.4(c).

Cuando se tienen dos lechos fluidizados comunicados entre sí, se igualan los niveles a ambos lados (Figura 2.4(d)). Además, la diferencia de presión entre dos puntos del lecho fluidizado, como ocurre en la fluido-estática, es proporcional a la diferencia de altura entre los dos puntos (Figura 2.4(e)).

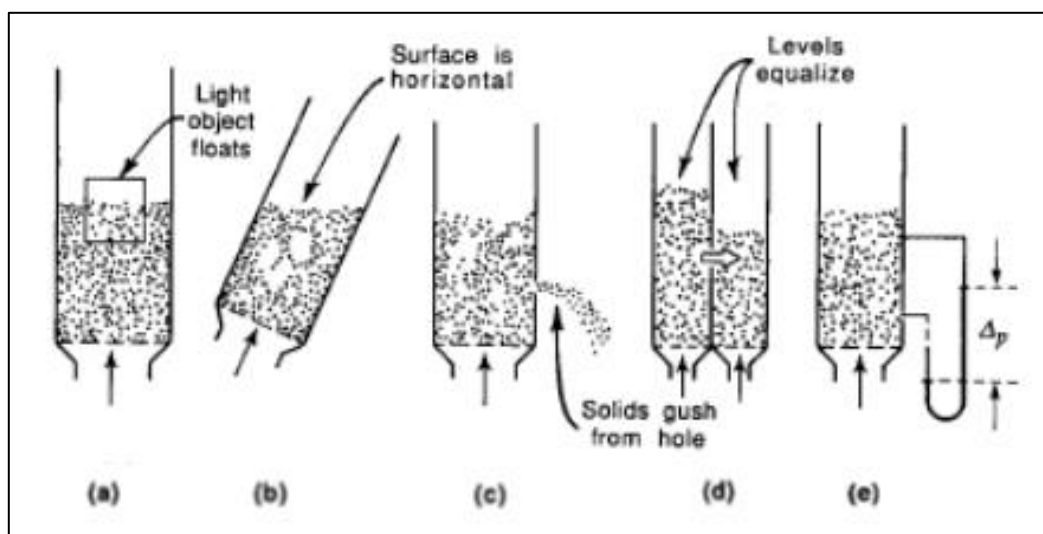


Figura 2.4. Comportamiento fluido de un lecho de partículas fluidizado: (a) Los objetos ligeros flotan sobre la superficie del lecho; (b) La superficie se mantiene horizontal al inclinar el lecho; (c) Las partículas abandonan el lecho describiendo un chorro a través de un orificio practicado en la pared. (d) Al poner en contacto dos lechos sus niveles se igualan; (e) La diferencia de presión entre dos puntos del lecho es proporcional a la diferencia de altura entre ellos [1]

2.3. VENTAJAS Y DESVENTAJAS DE LOS LECHOS FLUIDIZADOS PARA APLICACIONES INDUSTRIALES

Dado su comportamiento y al permanente movimiento de las partículas en su interior, los lechos fluidizados poseen ciertas características que los hacen presentar ciertas ventajas y desventajas para sus aplicaciones en la industria. A continuación se presentan alguna de sus ventajas:

- El buen comportamiento fluido que presentan las partículas permite un control continuo y sencillo de las operaciones.
- El mezclado rápido de las partículas permite alcanzar valores de temperatura constantes en todo el lecho, con lo que conlleva un control sencillo y seguro de las operaciones.
- En un lecho con partículas bien mezcladas presenta una gran respuesta a cambios bruscos en la temperatura, y responde lentamente a los cambios en las condiciones, por lo que le da un amplio margen de seguridad, evitando pérdidas de temperatura en reacciones altamente exotérmicas.
- La circulación de sólidos entre dos lechos fluidizados permite eliminar o añadir grandes cantidades de calor producido o necesario en grandes reactores.
- Su utilización es conveniente para operaciones a gran escala.
- Las velocidades de transferencia de calor y masa entre el gas y las partículas son altas en comparación con otros métodos de contacto.
- La tasa de transferencia de calor entre un lecho fluidizado y un objeto sumergido en su interior es elevada. Por lo tanto, los intercambiadores de calor dentro de los lechos fluidizados requieren áreas de superficies de contacto relativamente pequeñas.

Los lechos fluidizados también presentan algunas desventajas:

- Para lechos fluidizados de partículas muy finas, la dificultad para definir el flujo del gas supone un mezclado ineficiente. Esto puede ser realmente importante cuando se requiere una conversión importante de reactantes gaseosos o de alta selectividad para una reacción intermedia.
- La rápida mezcla de los sólidos en el lecho provoca tiempos de residencia de los sólidos en el reactor no uniformes. Para el tratamiento continuo de sólidos, esto da un producto no uniforme y un rendimiento más pobre, especialmente a altos niveles de conversión. Para reacciones catalíticas, el movimiento de las partículas catalizadoras porosas, que capturan y liberan moléculas de gas reactivo continuamente, contribuyen a la mezcla del reactivo gaseoso, reduciendo así el rendimiento del sistema.
- Los sólidos facturables se pulverizan y son arrastrados por la corriente de gas y por lo tanto deberán de ser reemplazados.
- La erosión de las tuberías y de los recipientes puede ser muy grande debida a la abrasión que producen las partículas.

- Para las operaciones no catalíticas a altas temperaturas, la aglomeración y sinterización de las partículas finas puede requerir una disminución en las temperaturas de las operaciones, reduciendo así la velocidad de la reacción de forma considerable.

2.4. CALIDAD DE FLUIDIZACIÓN

La facilidad con la que las partículas fluidizan y las diferentes condiciones de operación varían mucho de unos sistemas a otros y se ven afectadas por múltiples factores. El primero es el tamaño y la distribución de los sólidos. En general, las partículas finas tienden a agruparse si están húmedas, con lo que el lecho debe agitarse para poder mantener las condiciones de fluidización. Existen diversos métodos para evitar esta disminución de la calidad de fluidización, como pueden ser la utilización de agitadores mecánicos, velocidades del gas relativamente altas o la vibración mecánica del lecho [3, 4]. Las partículas finas con una gran distribución de tamaños pueden ser fluidizadas en un amplio rango de velocidades superficiales de gas, lo que permite operaciones flexibles con lechos grandes y profundos.

Por el contrario, los lechos con partículas grandes con distribución de tamaños uniformes a menudo fluidizan mal, con sacudidas, aparición de chorros y slugging, lo que puede causar graves daños estructurales en lechos de gran tamaño. La calidad de fluidización de estos lechos se puede mejorar mediante la adición de una pequeña cantidad de partículas finas, las cuales actuarían como lubricantes. Además las partículas grandes fluidizan en un intervalo de velocidad del gas mucho más limitado, por lo que se deben utilizar lechos menos profundos.

Un segundo factor muy importante es la relación de densidades entre el fluido y las partículas. Normalmente, los sistemas de líquido-sólido fluidizan de manera homogénea, mientras que los sistemas de gas-sólidos suelen mostrar heterogeneidades. Sin embargo, se pueden tener desviaciones de la norma con partículas de baja densidad en un medio gaseoso o de partículas de alta densidad en líquidos poco densos.

Muchos otros factores pueden afectar a la calidad de la fluidización, como son la geometría del lecho, los dispositivos de alimentación del gas, el tipo de partículas de sólidos utilizados, y si los sólidos puedan fluir de forma libre o puedan aglomerarse.

2.5. CLASIFICACIÓN DE LAS PARTÍCULAS DE FLUIDIZACIÓN

A partir de experimentos con lechos fluidizados se ha descubierto que no todos los materiales fluidizan de la misma manera, por ello, Geldart [5] estudió la fluidización de gran cantidad de partículas de diferentes tipos y tamaños, clasificándolas en cuatro grupos distintos en función de su densidad (relativa al gas de fluidización) y diámetro. Ordenándolas de menor a mayor tamaño, las clasificaciones de partículas de Geldart son las siguientes:

- **Grupo C:** Se tratan de partículas cohesivas o polvos. Conseguir una fluidización normal de este tipo de partículas es muy difícil ya que las fuerzas que aparecen entre las partículas resultan ser mayores que las fuerzas debidas a la acción de la corriente de fluidización. Para poder ser fluidizadas deben ser mezcladas con partículas de mayor tamaño. A este tipo de partículas son por ejemplo los polvos de maquillaje faciales, las harinas y el almidón, entre otros.
- **Grupo A:** Se trata de partículas que pueden ser aireadas, o materiales que tienen un tamaño de partícula medio y/o densidad de partículas baja ($\leq 1,4 \text{ g/cm}^3$). Estos sólidos fluidizan con facilidad a bajas velocidades y presentan burbujeo controlado con burbujas pequeñas a elevadas velocidades superficiales. Las partículas FCC (Fluid Catalytic Cracking) son representativas de estos sólidos.
- **Grupo B:** Se trata de partículas parecidas a la arena o la mayoría de las partículas de tamaño y densidad media ($1,4 \leq \rho \leq 4 \text{ g/cm}^3$). Estos sólidos se fluidizan bien, se forman burbujas vigorosas que crecen hasta tamaños importantes.
- **Grupo D:** Se tratan de partículas de gran tamaño y/o alta densidad. Lechos profundos de este tipo de partículas son difíciles de fluidizar. Tienen un comportamiento errático, con explosiones de burbujas y canales pronunciados o chorros si la distribución del gas es muy desigual. Ejemplos de este tipo de partículas son por ejemplo granos de café y guisantes, carbones gasificantes, algunos minerales sólidos. Por lo general se procesan en lechos bajos o en lechos de chorro Figura 2.3.

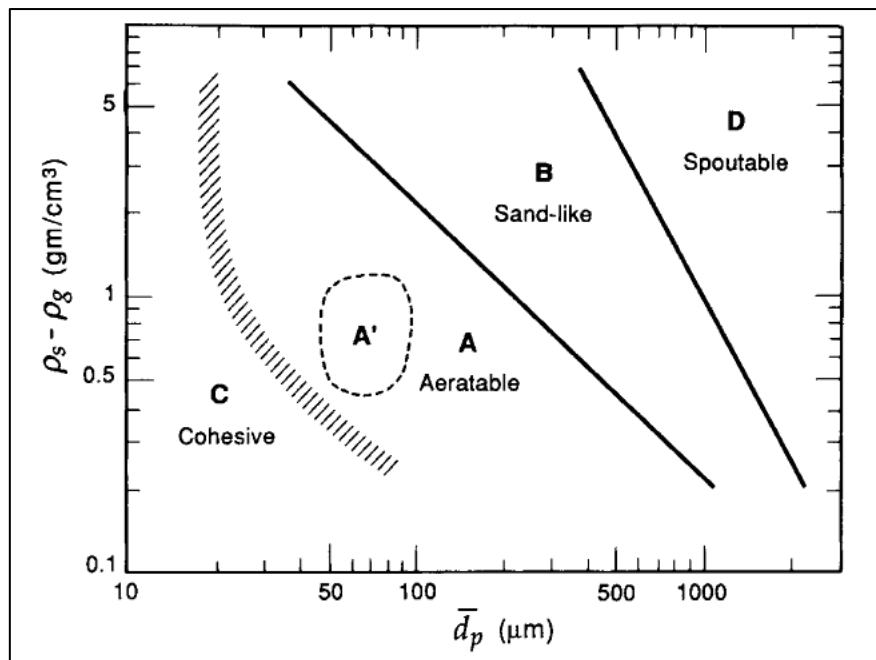


Figura 2.5. Clasificación de Geldart de partículas [1].

2.6. CÁLCULO DE PÉRDIDA DE CARGA DEL LECHO Y VELOCIDAD DE MÍNIMA FLUIDIZACIÓN

Perdida de carga del lecho

El gas a medida que asciende a través del lecho fijo experimenta una pérdida de carga, debido a la resistencia por fricción, que aumenta con el incremento de la velocidad. Al cabo del tiempo se llega a un punto donde el empuje que ejerce el gas sobre las partículas se iguala con el peso aparente de éstas con el lecho. En este punto las partículas se encuentran suspendidas por el gas, y se considera que el lecho se encuentra fluidizado.

El comienzo de la fluidización está asociado a la pérdida de carga que sufre el gas al atravesar el lecho. La pérdida de carga se puede expresar como el peso aparente de las partículas del lecho entre la sección perpendicular a la dirección del gas.

$$\Delta p = \frac{(\rho_p - \rho_g)L \cdot A(1 - \varepsilon)g}{A} \quad (2.1)$$

Donde ρ_p es la densidad de las partículas sólidas, ρ_g es la densidad del gas, L es la longitud del lecho, A es la sección transversal del lecho y ε es la fracción de vacío. Simplificando (2.1) se obtiene que la caída de presión por unidad de longitud es:

$$\Delta p/L = (\rho_p - \rho_g)(1 - \varepsilon)g \quad (2.2)$$

En la Figura 2.6 se muestra la caída de presión en función de la velocidad superficial. Hasta alcanzar el estado de mínima fluidización, como predice la ecuación de Ergun [6] la caída de presión aumenta según se va incrementando la velocidad superficial.

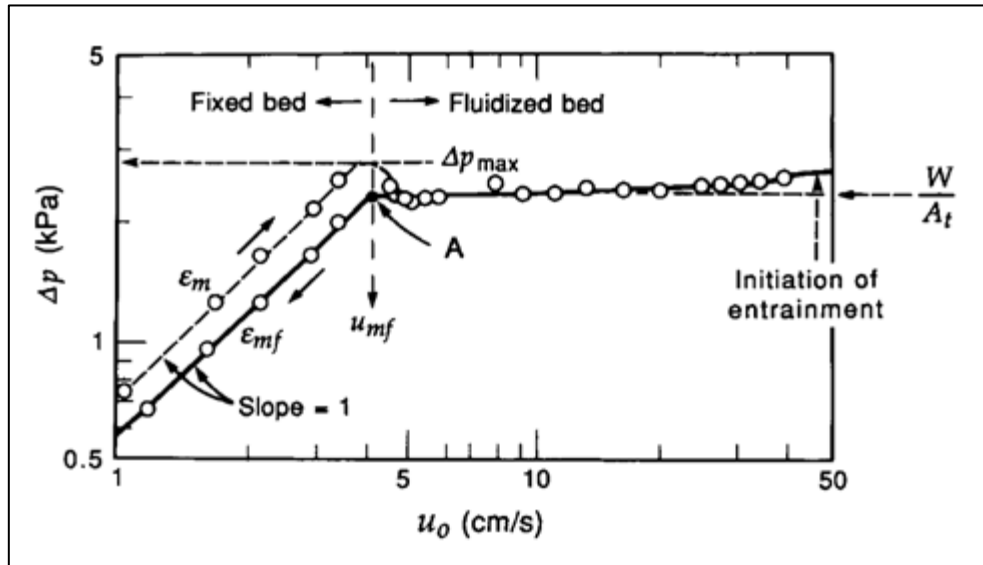


Figura 2.6. Curva Perdida de carga-Velocidad para sistemas tipo gas-sólido [1].

Como se puede observar en la Figura 2.6, cuando se sobrepasa la velocidad de mínima fluidización (u_{mf}) no se produce un aumento de la caída de presión, si no que cambiará la altura y la porosidad del lecho para seguir cumpliendo la ecuación (2.2).

Ergun [6] desarrolló una expresión para calcular la caída de presión en un lecho fijo al ser atravesada por una corriente de gas:

$$\frac{\Delta p_{fr}}{L_m} g_c = 150 \frac{(1-\varepsilon_m)^2}{\varepsilon_m^3} \frac{\mu u_o}{(\phi_s d_p)^2} + 1.75 \frac{(1-\varepsilon_m)}{\varepsilon_m^3} \frac{\rho_g u_o^2}{\phi_s d_p} \quad (2.3)$$

Donde L_m es la altura del lecho, ε_m la fracción de vacío del lecho fijo, μ la viscosidad del gas, u_o la velocidad superficial del gas, ϕ_s la esfericidad de las partículas, d_p el diámetro medio de las partículas y ρ_g es la densidad del gas.

Velocidad de mínima fluidización

Para obtener la velocidad de mínima fluidización combinamos las ecuaciones (2.2) y (2.3), obteniéndose la siguiente ecuación:

$$Ar = 1.75 \frac{1}{\varepsilon_m^3 \phi_s} Re_{p,mf}^2 + 150 \frac{(1-\varepsilon_m)}{\varepsilon_m^3 \phi_s^2} Re_{p,mf} \quad (2.4)$$

Donde el número de Arquímedes viene definido por:

$$Ar = \frac{d_p^3 \rho_g (\rho_p - \rho_g) g}{\mu^2} \quad (2.5)$$

Y el número de Reynolds en condiciones de mínima fluidización:

$$Re_{p,mf} = \frac{U_{mf} \cdot \rho_g \cdot d_p}{\mu_g} \quad (2.6)$$

En el caso especial de partículas muy pequeñas, simplificando las ecuaciones anteriores, se obtiene la siguiente expresión de la velocidad de mínima fluidización.

$$U_{mf} = \frac{d_p^2 (\rho_p - \rho_g) g}{150 \mu} \frac{\varepsilon_m^3 \phi_s^2}{(1-\varepsilon_m)}, \quad Re_{p,mf} \leq 20 \quad (2.7)$$

Para partículas muy grandes se obtiene una expresión:

$$U_{mf}^2 = \frac{d_p (\rho_p - \rho_g) g}{1.75 \rho_g} \varepsilon_m^3 \phi_s, \quad Re_{p,mf} > 1000 \quad (2.8)$$

Las ecuaciones (2.7) y (2.8) son explícitas y aproximadas. Para rangos intermedios del número de Reynolds no se pueden utilizar.

Velocidad terminal de las partículas

Cuando una partícula de un tamaño d_p cae a través de un fluido, la velocidad terminal de caída libre de la partícula puede ser estimada mediante el uso de la mecánica de fluidos según la ecuación (2.9). Cuando un lecho está fluidizado, en el momento que se supera la velocidad terminal de las partículas, estas pueden ser proyectadas fuera del lecho.

$$U_t = \left[\frac{4d_p(\rho_p - \rho_g)g}{3\rho_g C_D} \right]^{1/2} \quad (2.9)$$

Donde C_D es el coeficiente de arrastre.

Los lechos fluidizados, sin embargo, pueden funcionar a velocidades muy superiores a la velocidad terminal para prácticamente todos los sólidos, sin excesivo arrastre de las partículas de los sólidos. Esto se debe a que una gran fracción del gas que fluye a través del lecho en forma de burbuja a gran velocidad, así evitando pasar por la mayoría de los sólidos del lecho. Si se utilizan ciclones (ver Figura 2.2) para devolver los sólidos arrastrados fuera de lecho, se pueden utilizar velocidades de gas aún mayores.

2.7. APLICACIONES INDUSTRIALES DE LA FLUIDIZACIÓN

Debido a sus diversas particularidades, como las grandes superficies de contacto sólido-gas y sólido-sólido existentes, la fluidización ha encontrado aplicación en distintos sectores de la industria. Desde la aparición del primer gasificador de carbón en 1926, se han desarrollado muchas aplicaciones industriales basadas en el fenómeno de la fluidización. Principalmente se han desarrollado aplicaciones para la industria petroquímica y metalúrgica.

A continuación de forma resumida se exponen los principales procesos y aplicaciones de los lechos fluidizados:

Operaciones físicas: las principales aplicaciones son

- Intercambiador de calor
- Solidificación de masa fundida
- Recubrimiento con plástico de objetos metálicos
- Secado de sólidos
- Recubrimiento de objetos y el crecimiento de partículas
- Procesos de absorción

Reacciones de síntesis:

- Lecho fluidizado rápido: Síntesis de Fischer-Tropsch
- Lecho fluidizado de partículas finas: Anhídrido ftálico, acetato de vinilo, acrilonitrilo, dicloruro de etileno, etc.

- Lecho fluidizado burbujeante de partículas gruesas: Polietileno y polipropileno

Craqueo de hidrocarburos: Rotura de hidrocarburos en elementos de menor peso molecular, por medio de las denominadas reacciones de craqueo.

- Craqueo catalítico fluido (FCC)
- Craqueo térmico.

Combustión: Para la combustión de combustibles fósiles de baja calidad o que no se pueden quemar en calderas convencionales de forma eficiente se desarrolló la combustión en lechos fluidizados.

- Combustión fluidizada del carbón
- Incineración de los residuos sólidos

Gasificación: Proceso en que se quema materia sólida, con aporte mínimo de oxígeno, con objetivo de eliminar partículas e impurezas y convertirlo en gas.

- Gasificación del carbón
- Gasificación de residuos sólidos.

Activación del carbón: En la activación del carbón mediante lecho fluidizado se emplea como materia prima carbón, madera u otros residuos vegetales. La activación se utiliza para los siguientes procesos:

- Adsorción de contaminantes en corrientes gaseosas
- Separación de sustancias orgánicas
- Recuperación de solventes

Calcinación: Las partículas de caliza y dolomita se pueden calcinar de forma sencilla en un lecho fluidizado quemando directamente combustible en el lecho.

Reacciones con sólidos: Los lechos fluidizados se utilizan también para realizar modificaciones de las características de algunos minerales

- Tostación para obtener metales a partir de sulfuros de mineral
- Producción de silicio de alta pureza para la fabricación de semiconductores y células fotovoltaicas
- Cloración y fluoración de óxidos de metal
- Reducción de óxido de hierro

Biofluidización: El cultivo de microorganismos resulta ser una de las aplicaciones más peculiares de la fluidización.

2.8. MEZCLADO Y SEGREGACIÓN

Mezclado

Para muchos procesos industriales conseguir un buen mezclado de sólidos de partículas de diferentes densidades y tamaños es de gran importancia. De forma general, las partículas que pueden fluir segregarán naturalmente. Por ejemplo, en una bolsa de cereales las partículas más pequeñas se desplazarán hacia la parte de abajo del recipiente mientras que las partículas más grandes permanecerán en la parte superior. Las mezclas de líquidos y gases, si se dejan el tiempo suficiente, acaban por homogeneizar la mezcla. Sin embargo, las mezclas sólidas nunca alcanzarán tal homogeneización ya que tienden a segregar.

Se conocen tres mecanismos de mezclado para sólidos [7]:

- Por convección, cuando un grupo de partículas de un componente se traslada en bloque a una región ocupada por otro componente.
- Por difusión, se origina cuando se produce la transferencia de partículas aisladas de un componente a regiones ocupadas por otro.
- Por cizallamiento, cuando existen planos de deslizamiento en el interior del mezclador, es una variante del mezclado convectivo.

Segregación

El fenómeno de la segregación se produce cuando tenemos partículas con distintas propiedades. El estado natural de una mezcla es el de segregarse si las partículas difieren en alguna característica. Las propiedades que favorecen la segregación son las siguientes:

- Distribución del tamaño: El tamaño es una de las principales causas de segregación. Cuanto más grandes sean las partículas, mayor nivel de segregación presentan.
- Densidad: Cuando se fluidiza un lecho, las partículas de mayor densidad sedimentan junto con las partículas más gruesas.
- Forma: Las partículas esféricas tienden a comportarse como sólidos gruesos, mientras que las no esféricas presentan un comportamiento similar a los finos.
- Adhesión: Si las partículas experimentan algún fenómeno de adhesión con las paredes, puede presentar problemas de segregación.

Cohesividad: Si las partículas son cohesivas tienden a permanecer juntas, por lo tanto se reduce la segregación.

Para los casos anteriores se pueden identificar cuatro mecanismos de segregación [8]:

- Segregación por trayectoria: Las distancias recorridas por las partículas son proporcionales al tamaño de las mismas, cuanto más grandes son a mayor distancia son descargadas (Figura 2.7).
- Percolación de partículas finas: Si una masa de partículas es alterada de tal forma que las partículas individuales se muevan, se produce un reordenamiento en el empaquetado de las partículas. Las partículas más pequeñas pueden percolar entre las grandes, por esta razón las partículas finas se encuentran preferencialmente en el fondo y las partículas más gruesas en la superficie (Figura 2.7).
- Ascenso de partículas grandes: Si se hace vibrar una mezcla de partículas de diferentes tamaños, las partículas más grandes se moverán hacia arriba. Esto se puede demostrar de forma sencilla colocando una bola grande en la parte inferior de un lecho de arena, agitando el vaso que contienen el lecho la bola de asciende a la superficie del lecho. En la Figura 2.8 se puede ver una secuencia de capturas del experimento con una bola de acero. A este experimento se le conoce como ‘Brazil-nut effect’.
- Segregación por elutriación: Cuando una mezcla de sólidos se fluidiza, las partículas más pequeñas pueden ascender, siempre y cuando la velocidad del gas que circula a través del lecho exceda la velocidad terminal de las mismas (Figura 2.7).

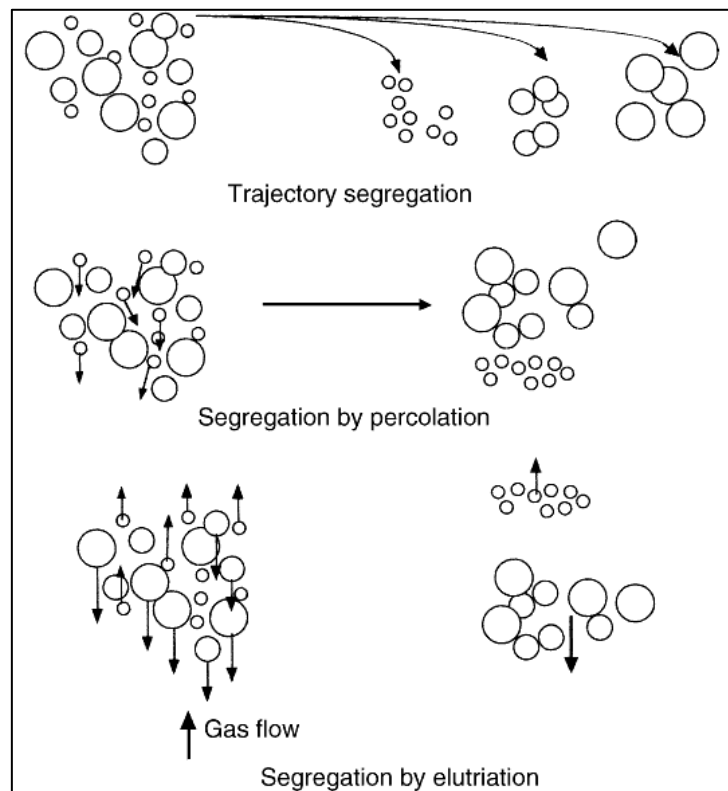


Figura 2.7. Mecanismos de segregación. [8]

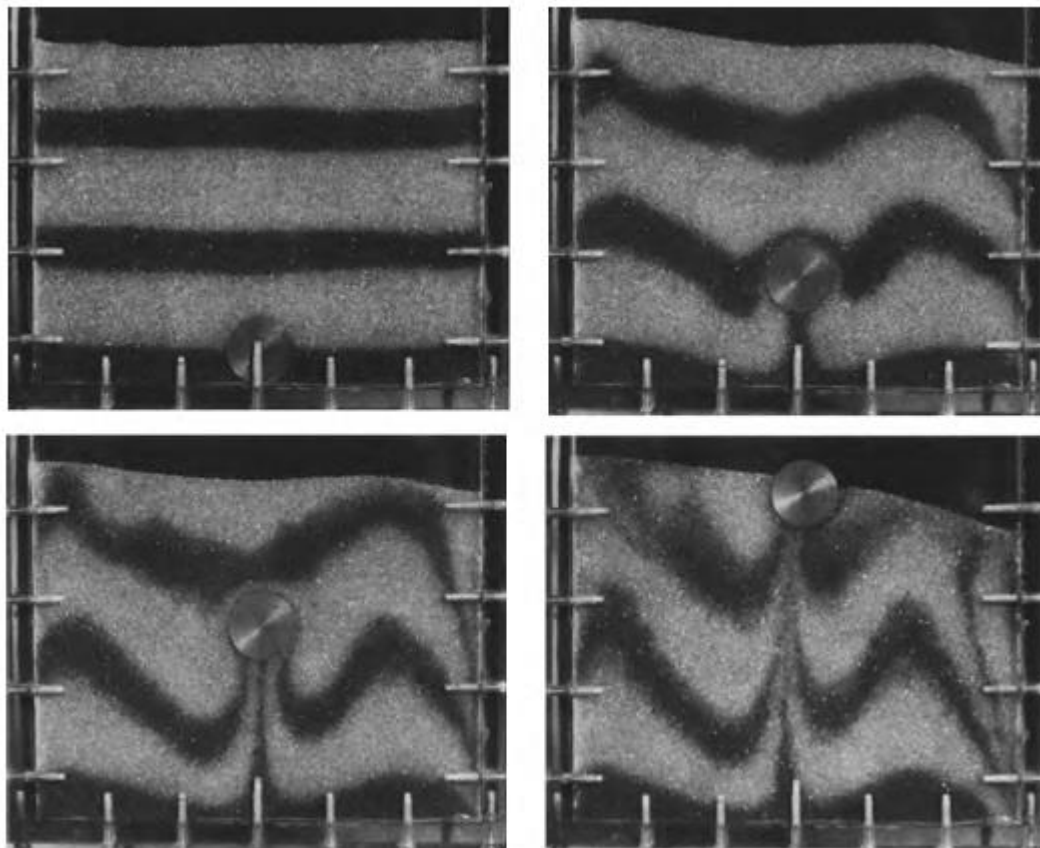


Figura 2.8. Mecanismos de segregación; 'Brazil-nut effect'. [8]

Movimiento de sólidos

En los lechos fluidizados la ascensión de burbujas de gas en su interior provoca la circulación de sólidos, mientras que el entremezclado a pequeña escala se produce principalmente dentro de las estelas que acompañan a las burbujas (ver Figura 2.9). Cuando los sólidos del lecho tienen diferentes tamaños o densidades, las partículas de mayor tamaño o densidad tienden a depositarse en el fondo del lecho, pero este movimiento es contrarrestado por la circulación del sólido. La burbuja al ascender arrastra consigo una estela de partículas las cuales son depositadas en la superficie del lecho

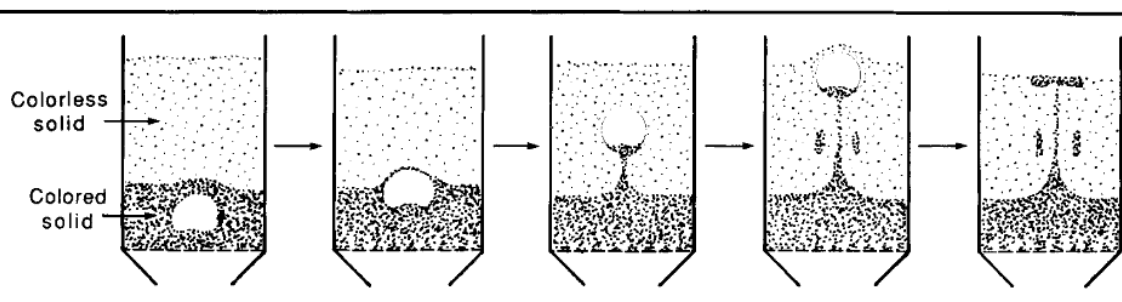


Figura 2.9. Muestra del arrastre de sólidos de mayor tamaño o densidad producido por una burbuja al ascender. [1]

A altas velocidades de flujo en lechos de partículas grandes domina el proceso de mezclado. Sin embargo si se reduce la velocidad de flujo las partículas más grandes y/o pesadas se desplazarán progresivamente a la parte inferior del lecho. Por lo tanto el mezclado y la segregación de los diferentes sólidos es un proceso de equilibrio que depende de las condiciones del lecho. En general existen numerosos aspectos a la mezcla y movimiento de los sólidos en lechos fluidizados.

También se producen movimiento de partículas al desplazarse estas a donde antes había una burbuja, de esta forma se produce una recirculación de las partículas, lo que produce el mezclado de las partículas. A lo largo de su camino, la estela de la burbuja va intercambiando su contenido con el resto de partículas del lecho y dejando atrás partículas que estaba transportando, a este fenómeno se le denomina desprendimiento de estela (wake shedding [9]). Los fenómenos descritos anteriormente se pueden observar en la Figura 2.10.

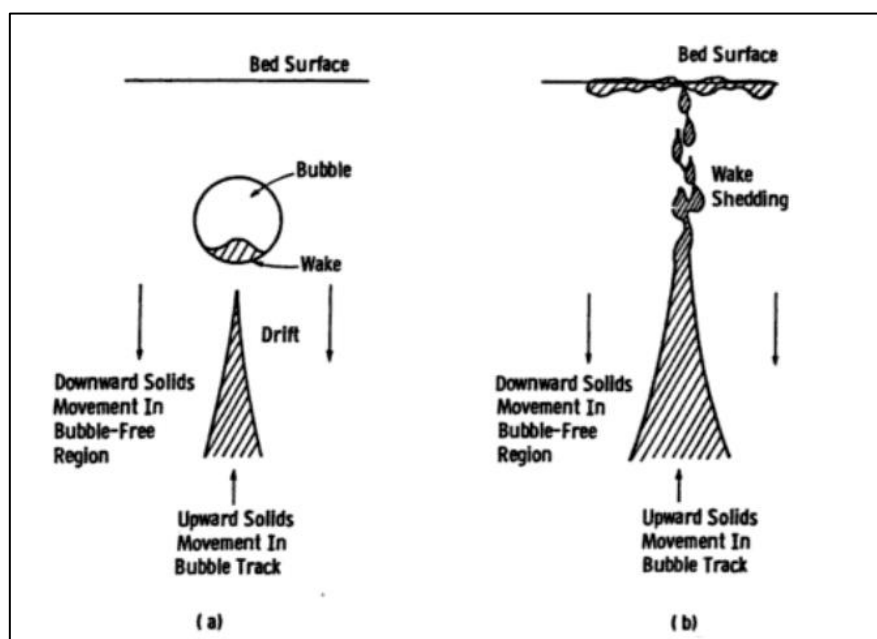


Figura 2.10. Mecanismos de mezclado de sólidos [9]

En la Figura 2.11 podemos ver con más detalle los movimientos de las partículas que se producen alrededor de una burbuja que asciende por un lecho. Se puede observar como algunos sólidos que están descendiendo se introducen en la “cloud region” y son añadidos a la estela de la burbuja, ascendiendo junto a ella y el resto de partículas se vuelven a reincorporar a la mezcla y descienden junto a ella.

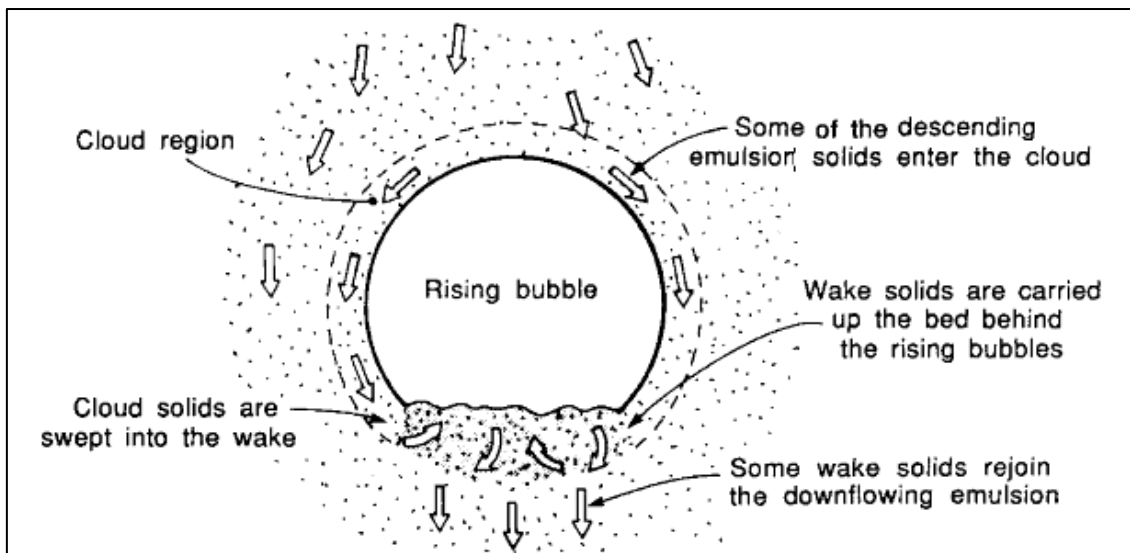


Figura 2.11. Modelo para el mecanismo de intercambio de sólidos entre el flujo descendente de sólidos y los que fluyen hacia arriba junto con las estelas. [1]

Equilibrio mezcla-segregación

Numerosos procesos de industriales requieren de lechos fluidizados para llevar a cabo mezclas de sólidos de densidades diferentes. El ratio de tamaño de los sólidos y la velocidad del gas deben ser estudiados. Por ello el estudio del equilibrio de la mezcla-segregado es de vital importancia.

Se han llevado a cabo muchos estudios sobre el fenómeno del mezclado-segregado en lechos fluidizados, especialmente para sistemas viarios de diferentes tamaños y/o densidades de partículas [10]. En estos casos, la segregación se produce a velocidades cercanas de mínima fluidización de las partículas más grandes o pesadas del lecho.

Investigaciones llevadas a cabo por Rowe et al. [11-12], Nienow et al. [13-14], Chiva [15-17], los cuales establecieron la siguiente terminología para componentes empleados en lechos fluidizados:

- Jetsam: componente que se hunde en última instancia
- Flotsam: componente que flota en la parte superior del lecho.

Las conclusiones sacadas de las diferentes investigaciones se pueden resumir de la siguiente manera:

- Para sólidos del mismo tamaño pero de diferente densidad, la segregación se produce fácilmente. Cuando esto ocurre, se forma una capa del material más denso en el fondo del lecho. La parte superior siempre contendrá algunos sólidos densos, dispersos uniformemente en mayor o menor medida.
- Partículas de diferente tamaño pero de misma densidad también segregará, pero no tan fácilmente. Incluso partículas de órdenes de magnitud de diferentes diámetros se mezclarán uniformemente en condiciones de moderado burbujeo.

- Cuando se tiene una velocidad del gas próxima a la velocidad de mínima fluidización U_{mf} , la segregación de las partículas jetsam puede ser severa. Sin embargo se observa que a mayores velocidades disminuye la segregación. La Figura 2.12 muestra el patrón de segregación en mezclas binarias. En la Figura 2.13 se muestra el comportamiento de dos mezclas, Figura 2.13(a) muestra una gran segregación del material más denso (ratio de densidades=1.8) y en la Figura 2.13(b) se muestra que incluso con una gran diferencia del tamaño de las partículas (ratio de tamaños=3.5) la segregación es menor.

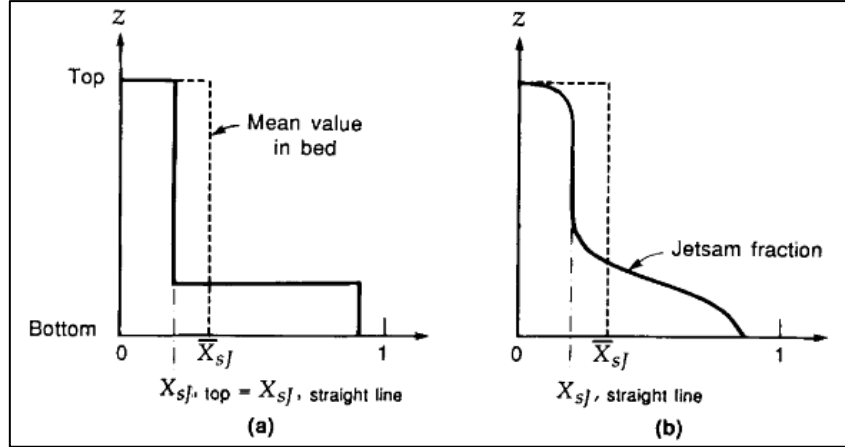


Figura 2.12. Distribución segregación de sólidos en mezclas binarias: (a) segregación idealizada a baja velocidad de fluidización (b) Segregación en condiciones de burbujeo severo. [1]

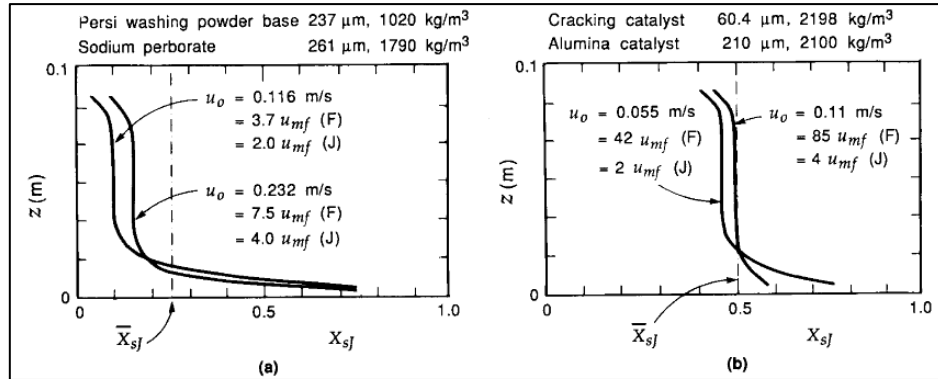


Figura 2.13. Segregación vertical de sólidos comerciales: (a) materiales de diferente densidad; (b) materiales de diferentes tamaños. [1]

Rowe et al. [9] propuso el uso de índices de mezclado de sólidos definido como:

$$M = \left(\frac{\text{fracción de jetsam en la parte superior del lecho}}{\text{fracción zona bien mezclada del lecho}} \right) = \frac{X_{sj,top}}{\bar{X}_{sj}} \quad (2.10)$$

Donde $M=0$ corresponde a una completa segregación, mientras que $M=1$ corresponde a un completo mezclado.

Como se puede observar en la Figura 2.13 la fracción de jetsam es prácticamente constante en gran parte del lecho, se suele usar el siguiente valor para obtener un valor aproximado de M :

$$M = \frac{X_{SJ, \text{straight-line portion}}}{\bar{X}_{SJ}} \quad (2.11)$$

Índice de Mezclado

En sistemas binarios, una mezcla perfecta de partículas de igual tamaño y densidad (ver Figura 2.14), indica que, independientemente de donde tomemos una muestra, encontraremos la misma proporción de partículas blancas y negras. No es posible obtener una mezcla perfecta en un sistema real, por lo que se pretende es tener una mezcla al azar y evitar mezclas segregadas (ver Figura 2.14)

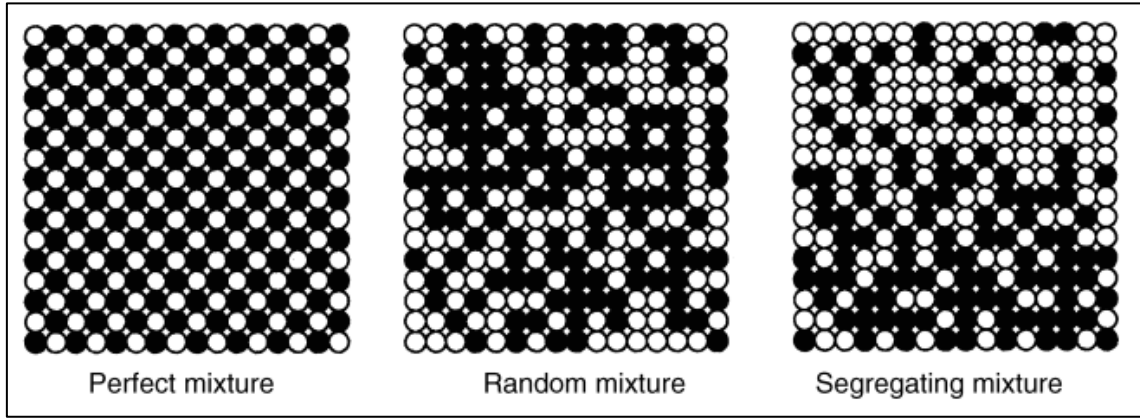


Figura 2.14. Tipos de mezclas. [8]

Para cuantificar el grado de mezclado de un sistema se tiene que recurrir a ciertos parámetros estadísticos como son el valor medio y la desviación estándar de una distribución de partículas.

En ocasiones se desconoce la verdadera composición de una mezcla, por lo que se realiza una estimación usando el valor medio [8]:

$$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i \quad (2.12)$$

La desviación estándar, σ , y la varianza, σ^2 , de la composición de una mezcla son medidas cuantitativas de la calidad de la mezcla. El verdadero valor de la varianza normalmente no es conocido, por lo que debe ser estimado:

$$S^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i - \mu)^2 \text{ cuando se conoce la composición } \mu \quad (2.13)$$

$$S^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2 \text{ cuando se desconoce la composición } \mu \quad (2.14)$$

Para un sistema de dos componentes en las ecuaciones 2.15 y 2.16 se muestra el valor de la varianza para el estado completamente no mezclado σ_0^2 y la varianza de mezclado aleatorio σ_R^2 :

$$\sigma_0^2 = P \cdot (1 - P) \dots \dots \dots (2.15)$$

$$\sigma_R^2 = \frac{P \cdot (1 - P)}{n} \quad (2.16)$$

donde P y (1-P) son las proporciones de los dos componentes determinados por las muestras y n es el número de partículas de cada muestra.

Calculando el valor de la varianza, S^2 , para cada instante de tiempo, se puede obtener el índice de mezclado IM. La siguiente tabla presenta las diferentes formas de obtener el índice de mezclado [18].

Autor	Índice de mezclado	Rango
Lacey	$IM = \frac{(\sigma_0^2 - \sigma^2)}{(\sigma_0^2 - \sigma_R^2)}$	0–1
Kramer	$IM = \frac{(\sigma_0 - \sigma)}{(\sigma_0 - \sigma_R)}$	0–1
Lacey, Weidendam y Bonilla	$IM = \frac{\sigma_R}{\sigma}$	<1–1
Ashton y Valentín	$IM^2 = \frac{(\log \sigma_0^2 - \log \sigma^2)}{(\log \sigma_0^2 - \log \sigma_R^2)}$	0–1
Poole, Taylor y Wall	$IM = \frac{\sigma}{\sigma_R}$	>>1–1
Carely-Macauley y Donald	$IM = \frac{(\sigma^2 - \sigma_R^2)}{\left(1 - \frac{1}{n}\right)}$	>>0–0

Tabla 1. Índices de Mezclado [18]

Para este proyecto se van a calcular los índices de mezclado de nueve simulaciones diferentes, empleando diversos índices de mezclado y seleccionando aquel que presente mayor robustez y se asimile más a los resultados experimentales. En particular, el índice de mezclado más empleado en la literatura consultada es el del de Lacey [7], por lo que en primer lugar se llevará a cabo el cálculo del índice de mezclado con este procedimiento. Se calcularán los tiempos de mezclado para cada una de las simulaciones y se compararán con los resultados experimentales.

Para calcular el índice de mezclado en este trabajo, mediante la simulación obtendremos la fracción de densidad de los sólidos y de vacío (fase gas) que tenemos en cada una de las celdas computacionales en que se dividirá el lecho. El valor, tanto de los porcentajes de densidad como de la fracción de vacío, fluctúa entre 0 y 1. Inicialmente como se puede ver en la Figura 2.15 tenemos dos franjas bien diferenciadas, en donde sólo existe un único tipo de sólido, en cada una de ellas el valor de los sólidos es de 0.6 y de fracción de vacío 0.4. En la zona que se encuentra por encima de los dos sólidos sólo tenemos vacío, por lo tanto el valor de la fracción de vacío es igual a 1

En el instante inicial de la simulación, como los sólidos están separados, el valor del índice de mezclado tiene que ser mínimo. Al finalizar la simulación el índice de mezclado tendrá que alcanzar su valor máximo.



Figura 2.15. Situación inicial del experimento.

2.9. Modelización numérica de lechos fluidizados

En las últimas décadas la utilización de herramientas de simulación ha evolucionado considerablemente pudiéndose utilizar para el estudio de lechos fluidizados. La **Figura 2.16** muestra los cuatro principales procedimientos de simulación más habituales para lechos fluidizados, ordenados por precisión y por consiguiente coste computacional: Direct Numerical Simulation (DNS), Discrete Element Method (DEM), Two Fluid Model (TFM), Discrete Bubble Modelling (DBM).

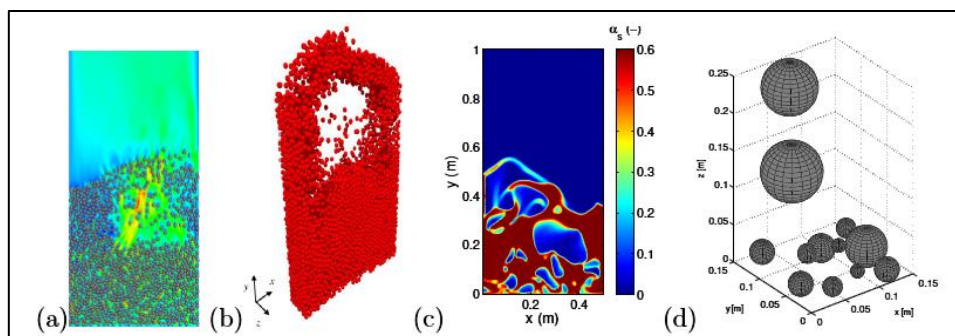


Figura 2.16: Diferentes modelos de modelización numérica de lechos fluidizados. (a) DNS, (b) DEM, (c) TFM, (d) DBM. [19]

El modelo DNS [20] analiza las interacciones entre partícula-partícula y partícula-fluido utilizando el modelo de Lattice-Boltzman. Este modelo es el más preciso pese a suponer un mayor coste computacional, por lo que normalmente se encuentra limitado a un número pequeño de partículas. Por esta razón no se utilizará para este proyecto.

DEM es un modelo de Lagrange-Euler que establece las partículas como sólidos rígidos y considera las interacciones entre partícula-partícula como queda reflejado en la Figura 2.17.

Una particularidad de los modelos DEM es que incluyen también la rotación de las partículas y por consiguiente, tiene un grado de libertad extra. El coste computacional es más bajo que el modelo DNS, aunque éste continúa siendo alto, dado que DEM modela el fluido como un medio continuo y no resuelve las características del fluido alrededor de las partículas. Por ello, las dimensiones del lecho y el número de partículas contenidas en él están limitadas. De hecho, las simulaciones DEM se miden por la cantidad de partículas utilizadas en la simulación.

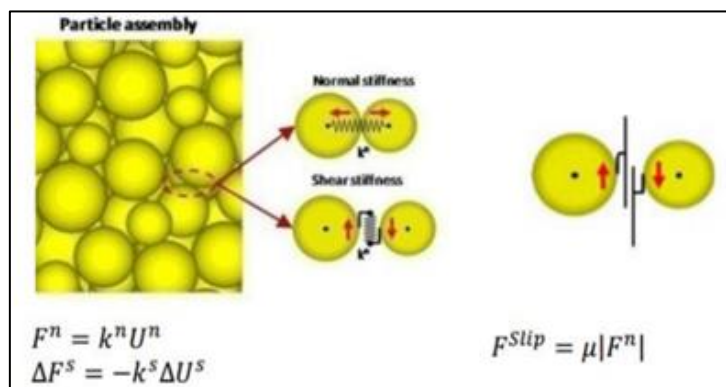


Figura 2.17: Comportamiento mecánico de contactos partícula-partícula en los sistemas DEM. Hamed Johnny Sarvani et al. [21]

El método Euleriano TFM es el más utilizado para el análisis de lechos fluidizados, en él se tratan tanto la fase partícula como la fase gas como dos medios continuos [22]. Las ecuaciones a resolver son las ecuaciones de Euler (**ver apéndice A.1**) y las interacciones entre partícula-partícula necesitan ser establecidas mediante una serie de modelos de cierre.

El modelo DBM es el de menor coste computacional y detalle. Se basa en el tamaño, la posición relativa y la velocidad de las burbujas. Al ser menor la información que tiene que procesar en comparación con la de otros métodos, se reduce notablemente el coste computacional.

Existen también modelos híbridos como el establecido por Sun et al. [23] en el que propone resolver la fase de gas con el modelo TFM y la fase discreta con DEM. Este tipo de simulaciones tiene la ventaja de proporcionar más información que el TFM pero tiene como inconveniente el acoplamiento de las dos fases.

Por consiguiente, tras analizar los anteriores modelos se considera que el modelo TFM es el ideal para el desarrollo de las simulaciones de los lechos fluidizados y por tanto será el empleado en este trabajo. Este modelo supone un coste computacional menor que los modelos DNS y DEM, y proporciona mayor información que el modelo DBM, el cual sería insuficiente para este trabajo.

3. SIMULACIÓN Y POSTPROCESADO

3.1. SIMULACIÓN

Para llevar a cabo las diferentes simulaciones que han hecho falta para la realización del proyecto, se ha utilizado el código MFIX.

MFIX es un código open-source en FORTRAN el cual se emplea para la resolución de las ecuaciones constitutivas que rigen en los sistemas gas-sólidos de los lechos fluidizados. Como se ha indicado previamente, se empleará el modelo de dos fluidos para la realización del presente proyecto.

Se va a realizar el estudio de mezclado ara tres tipos de partículas, todas ellas de la misma densidad, pero de diferentes diámetros. Por cada tipo de partícula se realizarán tres simulaciones a diferentes velocidades ($2U_{mf}$, $2,5U_{mf}$, $3U_{mf}$). Estos casos coinciden con aquellos realizados experimentalmente en [2], por lo que se podrá realizar una comparación directa entre los resultados experimentales y numéricos. A continuación se exponen todos los casos de simulación del proyecto:

Caso	Diámetro de partícula (mm)	Velocidad del gas (m/s)
1	0,5	0,54
2	0,5	0,675
3	0,5	0,81
4	0,7	0,88
5	0,7	1,1
6	0,7	1,32
7	1,15	1,34
8	1,15	1,675
9	1,15	2,01

Tabla 2. Casos de simulación.

La simulación consistirá en el mezclado de partículas del mismo tamaño y densidad. . En el estado inicial, las partículas se encontraran separadas en dos capas bien diferenciadas (ver Figura 2.15). Según avanza la simulación, se obtendrá una mezcla progresivamente más uniforme en el lecho, hasta alcanzar un estado completamente mezclado.

Dominio computacional

En el presente proyecto se realizaron simulaciones 2D del lecho pseudo-2D en el que se realizaron los experimentos [2]. Como ya se indicó anteriormente, este tipo de simulaciones se consideran representativas del comportamiento del lecho. Se eligió este tipo de simulación frente a una simulación puramente tridimensional debido a su menor coste computacional y al número de simulaciones a realizar.

El modelo computacional consiste en un lecho de 0,3 metros de ancho y 1,5 metros de alto. El modelo computacional fue elegido de tal forma que sus dimensiones fueran iguales que las del lecho experimental con el que posteriormente se compararán los resultados obtenidos [2]. De forma similar a los experimentos, el lecho se rellenará con las diferentes partículas, cada fase diferenciada de las partículas tendrá una altura de 0,15 metros, haciendo un total de 0,3 metros entre las dos fases. En la siguiente tabla se muestran las propiedades de las partículas empleadas para la simulación:

Diámetro de las partículas (mm)	Clasificación de Geldart [5]	Velocidad de mínima fluidización (m/s)	Densidad (kg/m ³)	Fracción de sólido	Fracción de vacío
0,4-0,6	B	0,27	2500	0,6	0,4
0,6-0,8	B-D	0,44			
1,0-1,3	D	0,67			

Tabla 3. Propiedades de las partículas.

MFiX simula el dominio usando un modelo de volúmenes finitos, por tanto, el dominio computacional es discretizado usando una malla. La malla utilizada en la simulación para resolución de las ecuaciones de gobierno con MFiX son cuadrados de 5 mm de longitud, por lo que tendremos 60 divisiones en la dirección horizontal y 300 divisiones en la dirección vertical. Trabajos previos en los que se emplearon partículas de las mismas características muestran que esta malla es lo suficientemente fina como para afirmar que los resultados son independientes del tamaño de la misma [24]. En las siguientes figuras se puede visualizar el mallado realizado para la simulación. En la Figura 3.1 se observa un zoom del mallado, donde se pueden ver en detalle las 60 cuadrículas en las que está dividido en la dirección del eje horizontal. La Figura 3.2 representa el mallado completo de la simulación.

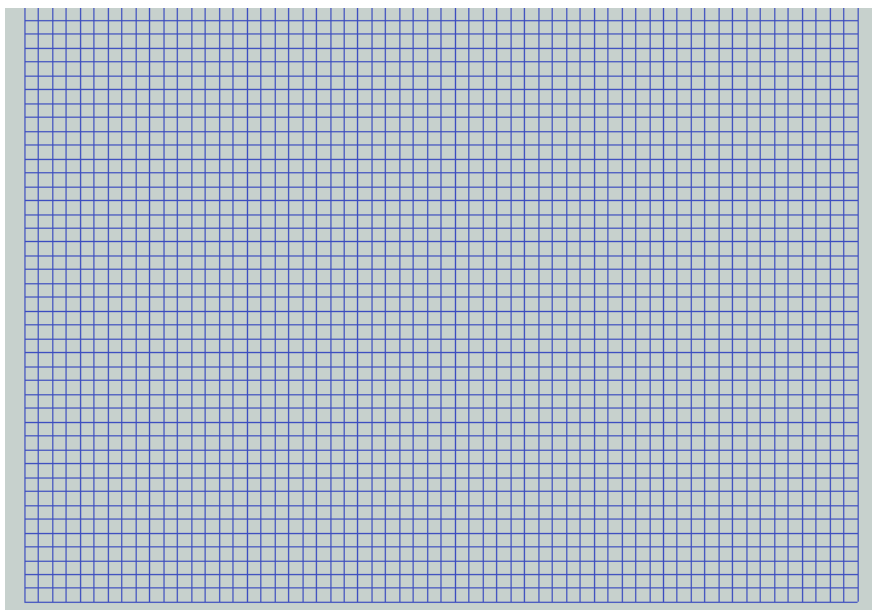


Figura 3.1. Zoom al mallado de la zona inferior.

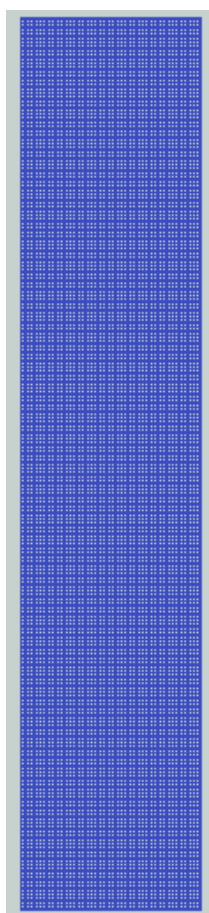


Figura 3.2. Mallado completo del modelo numérico.

Simulación en MFiX

Se ha elegido MFiX como alternativa a otros programas, como podría ser Ansys Fluent, por dos principales motivos. El primero, MFiX usa un método iterativo para resolver las ecuaciones de gobierno, por tanto, un paso de tiempo entre sucesivas iteraciones es empleado. A diferencia de otros códigos comerciales como Ansys Fluent, en el que el paso de tiempo está fijado por el usuario, el paso de tiempo puede variar automáticamente a lo largo de la simulación dependiendo de la convergencia de los resultados numéricos, lo que implica un menor coste computacional. El segundo, MFiX al ser programa de código abierto basado en Fortran permite la visualización y posible modificación del código principal.

Para realizar la simulación, MFiX necesita de un archivo en formato texto (.dat), en el que se le indicarán las condiciones iniciales, de contorno, las ecuaciones de cierre a emplear y una serie de parámetros de suma importancia a la hora de la resolución de las ecuaciones constitutivas.

El primer paso para recrear la simulación es el “set up” de las variables y los valores principales de la simulación:

Variable	Valor	Descripción
UNITS	SI	Todas las unidades estarán en sistema internacional
RUN_TPE	NEW	Nueva simulación
TIME	0	Tiempo de comienzo de la simulación
TSTOP	20	Tiempo de parada de la simulación
DT	0.5E-5	Paso de tiempo inicial
DT_MAX	0.5E-3	Máximo paso de tiempo
DT_MIN	5E-10	Mínimo paso de tiempo
XLENGTH	0.3	Ancho del lecho
IMAX	60	Número de nodos en el eje X
YLENGTH	1.5	Alto del lecho
JMAX	300	Número de nodos en el eje Y
NO_K	.TRUE.	2D, no existe dirección K
RO_g0	1.22	Densidad del gas
MU_g0	1.8E-5	Viscosidad del gas

Tabla 4. Set-up de la simulación

En el archivo mfix.dat, se debe declarar el modelo de arrastre que se va a usar (Gidaspow, ver Apéndice A.3). Se va a usar este modelo de arrastre, ya que ofrece una buena convergencia y es empleado en múltiples estudios con buenos resultados. La teoría cinética implementada para los términos de estrés de los sólidos en estas simulaciones serán los dados por Gidaspow [25] (ver apéndice A.4)

Archivo de entrada MFiX

Inicialmente se realizó un archivo de entrada (.dat) en el que solo se realiza la fluidización de un solo tipo de partícula. Este código demostró ser capaz de simular un lecho sin presentar problemas de convergencia. Por lo tanto, partiendo de ese código, se realizaron las modificaciones pertinentes para transformarlo en un código que pueda mezclar varios tipos de partícula, como es el caso del estudio. Ver Figura 3.3.

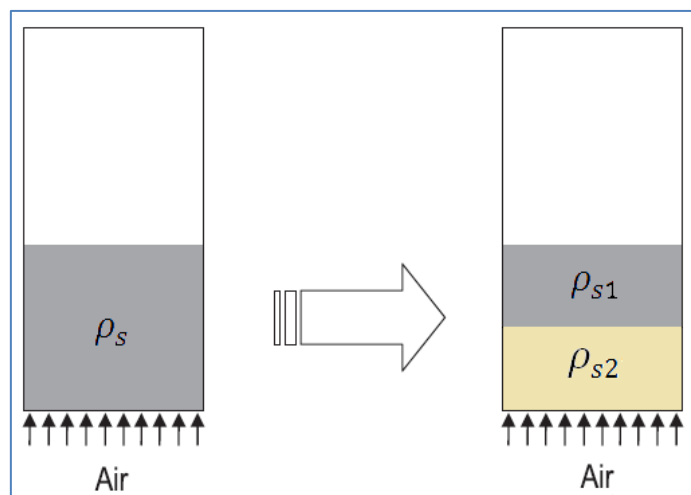


Figura 3.3. Modificación condición inicial

Para ello en el archivo .dat se modificará en el apartado de “Solid-phase Section”, donde se agregará una nueva línea. Se añadirá la variable MMAX con un valor igual a 2, lo que significa que tendremos dos tipos de sólidos. Se deberá escribir por separado las características de cada sólido, la densidad y el diámetro de cada uno de ellos.

También se tendrá que modificar el código en todos los sucesivos apartados del mismo, en “Initial Conditions Section” se deberá añadir una segunda fase sólida para definir todas las condiciones iniciales del segundo tipo de partícula. También se realizarán las modificaciones oportunas en “Boundary Conditions Section”, se ajustarán los datos de las condiciones de contorno de las paredes, del distribuidor de gas y de la “freeboard” para que coincidan con las condiciones de contorno del estudio. Ver **Apéndice B** para ver el archivo al completo.

Resultado de la simulación en MFiX

Una vez que el archivo .dat está terminado, se simulará mediante MFiX, obteniendo los resultados de la simulación. Para la visualización de los resultados se utilizará el visor ParaView. El inconveniente que tiene dicho programa es que nos muestra cada valor por separado, por lo que para poder estudiar cualitativamente los resultados de la simulación completa se tienen que poner en paralelo la reproducción de las tres variables a estudiar, ROP_s_1 (densidad relativa sólido 1), ROP_s_2 (densidad relativa sólido 2) y EP_g (fracción de vacío).

3.2. POSTPROCESADO

Una vez finalizada la simulación y, habiendo observado que los resultados cualitativos son satisfactorios, se llevó a cabo el postprocesado de estas y la extracción de resultados cuantitativos.

El Postprocesado de los datos se lleva a cabo en dos fases, una primera utilizando el programa MFiX (extracción de las variables de la simulación) y otra segunda fase usando el programa de cálculo Matlab (análisis de la información de estas variables).

MFiX

Para cada una de las simulaciones es necesario realizar un postprocesado de los datos. El postprocesado de los datos se lleva a cabo mediante una herramienta del propio MFiX. Dicha herramienta carga los datos de la simulación y los transforma a un formato de texto que puede ser leído por cualquier editor de texto.

Cuando realizamos una simulación en MFiX, este crea archivos que pueden ser visualizados en distintos visores, pero no se puede extraer datos, para ello necesitamos postprocesarlos. Con el postprocesado conseguimos extraer en un documento información sobre un tipo de variable en concreto. Esta herramienta nos permite seleccionar cada variable y de ella obtener toda la información posible, pudiendo sacar cualquier intervalo de tiempo, variables con valores medios, diferentes rangos, etc.

Para este estudio necesitamos extraer las variables EP_G (fracción de vacío del gas) y ROP_S1 (densidad relativa del sólido 1), para un intervalo de tiempo de 0 a 10 segundos, sin media de tiempos y para todo el dominio de la malla ($I[0,imax+2]$ y $J[0,jmax+2]$, donde imax y jmax son el número de celdas en las direcciones horizontal y vertical, respectivamente). Nótese que no es necesario extraer la densidad relativa del sólido 2 ya que, en cada celda computacional, debe cumplirse que la suma de las fases sea igual a la unidad. MFiX crea por defecto dos unidades más de rango por cada eje, esto sucede porque cuando se realiza el mallado MFiX crea dos celdas más denominadas celdas virtuales, uno a cada lado de los extremos, las cuales deben ser eliminadas.

Para terminar con el postprocesado de datos hay que solucionar los dos pequeños inconvenientes que aparecen al crear los archivos de texto, el primero es que MFiX crea un encabezado que no puede ser leído después por los programas de cálculo y el segundo es el excesivo tamaño del archivo que puede dar lugar a errores al intentar abrirlo. Ambos inconvenientes se pueden solucionar de forma sencilla utilizando la consola de Linux. Para el primer caso utilizando el comando “sed -i ‘1,Xd’ NombreArchivo”, donde X es la fila hasta donde llega el encabezado, se elimina dicho encabezado. Para el segundo de los inconvenientes con la herramienta “split -d -l 1872500 NombreArchivo”, donde cada paso de tiempo tiene 18725 líneas ($302 \times 62 + 1$) y lo multiplicamos por 100 para tener pasos de tiempo de 0.5 segundos, conseguimos partir el archivo principal en subarchivos más ligeros.

MATLAB

Una vez que el postprocesado se ha realizado con éxito y los archivos de texto con la información oportuna sobre la densidad relativa del sólido 1 y de la fracción de vacío han sido creados, utilizando el programa de cálculo de Matlab se analizarán los resultados y se obtendrá el tiempo de mezclado del lecho. Para ello calcularemos el Índice de Mezclado para cada paso de tiempo.

Como ya se ha indicado previamente, existen múltiples maneras de calcular este índice de mezclado. Sin embargo, estos índices están generalmente concebidos para modelos discretos y no continuos, como el modelo de dos fluidos que empleamos en el presente trabajo. A continuación se muestran los pasos llevados a cabo para la obtención de un índice de mezclado adecuado:

En primer lugar se cargarán los datos en Matlab. La misión principal del fraccionamiento de los archivos de texto generados por MFiX es evitar un excesivo consumo de memoria (y de tiempo) a la hora de cargar los datos en Matlab. Los datos se cargarán en forma de 4 vectores: coordenada x, coordenada y, fracción de vacío y porcentaje del sólido 1, siendo la fracción de sólido 2 consecuencia directa de las dos anteriores. De este modo, se podrán generar matrices en las que cada coordenada x e y tiene un valor asignado de cada una de las variables de estudio (matrices EP_G y ROP_s1 para la fracción de gas y de sólido 1, respectivamente).

Una vez se han cargado los datos en Matlab, por cada paso de tiempo ($dt=0,005$ segundos), se calculará el índice de mezclado. Para ello hay que extraer los valores de las dos matrices anteriormente creadas. Hay que tener en cuenta que MFiX creaba un mallado al postprocesar de 62×302 , así que se deben eliminar todas las posiciones que no pertenezcan al dominio computacional. Cabe señalar también que, para no incurrir en un consumo de memoria excesivo, una vez se obtienen los resultados para el paso de tiempo actual, las matrices de resultados son sobrescritas por aquellas del paso de tiempo siguiente.

El índice de mezclado se va a calcular con tres condiciones de tolerancia diferentes, además del método de Lacey [7]. Estas condiciones de tolerancia se comprobarán de forma gráfica para saber con emplearemos finalmente para la extracción de resultados. Para calcular

el IM se han definido tres variables (C fracción de vacío del gas, D fracción del sólido1 y E fracción del sólido2), donde impondremos que siempre que la fracción de vacío sea menor que 1, exista la fracción de sólido2 y esta sea igual o menor que la fracción del otro sólido1 multiplicada por una tolerancia (20%, 10% y 5%) se contabilizará como mezclado. Por lo tanto, el índice de mezclado se calculará usando la siguiente formula:

$$IM = \frac{\sum Nvalidas}{i_0 \cdot j_0} \quad (3.1)$$

Donde i_0 y j_0 , son las dimensiones iniciales que ocupan en reposo los dos sólidos conjuntamente, cada sólido tiene una dimensión de $30 \cdot 60$, por lo tanto $i_0 \cdot j_0 = 60 \cdot 60$. Nvalidas tomará el valor de 1 cuando se cumpla la expresión 4.2 y 0 cuando no se cumpla.

$$Nvalid = (C < 1) \& (E > 0) \& (E > (1 - t)D) \& (E < (1 + t)D) \quad (3.2)$$

donde t es la tolerancia, C la fracción de vacío del gas, E la fracción del sólido 1 y D la fracción del sólido 2.

Esto se realizara a todo el mallado para cada instante de tiempo, obteniéndose así el índice de mezclado para todo instante de tiempo.

Para ver el código completo de Matlab usado para calcular los índices de mezclado ver el **Apéndice C**.

4. RESULTADOS

La sección de resultados se divide en dos partes principales. En primer lugar, para una mejor comprensión del presente trabajo, se muestran resultados cualitativos del lecho fluidizado para un diámetro de partícula ($d_p = 0,5 \text{ mm}$) y una velocidad superficial de ($U = 2U_{mf}$).

En la segunda parte se estudia el tipo de índice de mezclado a emplear para calcular los tiempos de mezclado para uno de los casos de estudio. Estos tiempos de mezclado serán comparados con los resultados experimentales existentes [2].

Resultados cualitativos de la simulación en MFiX

En las siguientes imágenes se pueden ver los resultados de la simulación. Como se ha mencionado anteriormente, por cada paso de tiempo se ven las tres variables a estudiar por separado, la figura de la izquierda representa la densidad relativa del sólido 1 (ROP_s1), la figura central la densidad relativa del sólido 2 (ROP_s2) y la figura de la derecha la densidad de vacío (EP_g). Se han realizado ocho capturas, en el instante inicial $t=0$ segundos, en $t=0.25$ segundos, en $t=0.5$ segundos, $t=1$ segundo, en $t=1.5$ segundos, $t=2.5$ segundos, $t=5$ segundos y por ultimo $t=10$ segundos.

En cada una de las figuras aparece una leyenda con un código de colores, el color rojo indica la mayor concentración posible de ese componente y el color azul el mínimo posible.

En la Figura 4.1 se puede ver el estado inicial de la simulación, el lecho se encuentra fijo. Se pone en marcha la simulación y en la Figura 4.2 se observa como el lecho expande, también como empiezan a aparecer las primeras burbujas y algunas partículas de la superficie son proyectadas.

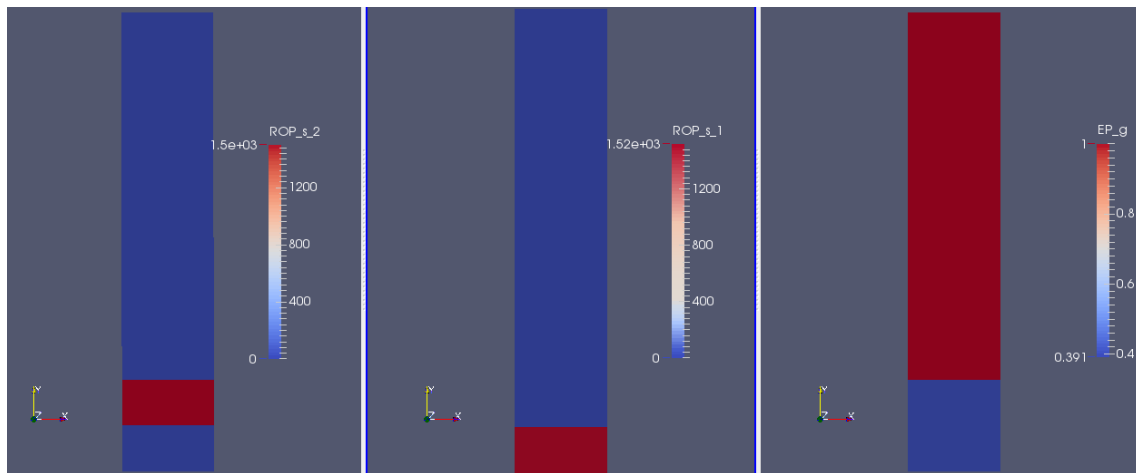


Figura 4.1. Captura de la simulación. $t=0 \text{ s}$

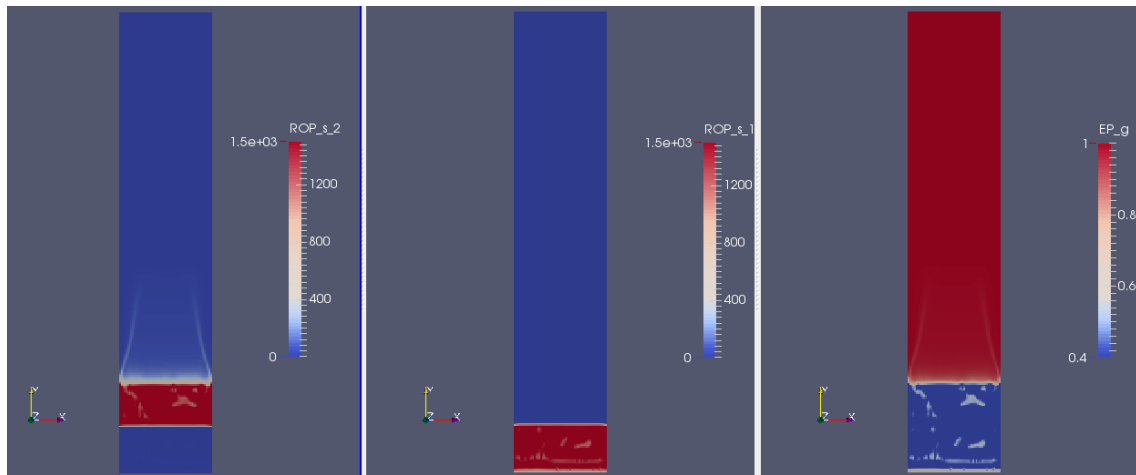


Figura 4.2. Captura simulación. $t=0,02$ s.

En la Figura 4.3, se observan grandes burbujas que empujan a los dos sólidos hacia arriba, pero aún no se están mezclando los dos componentes. En la Figura 4.4, se ve como el primer grupo de grandes burbujas han atravesado el primer sólido por completo y empiezan a pasar a través del segundo, aquí aún apenas existe mezclado de los dos sólidos.

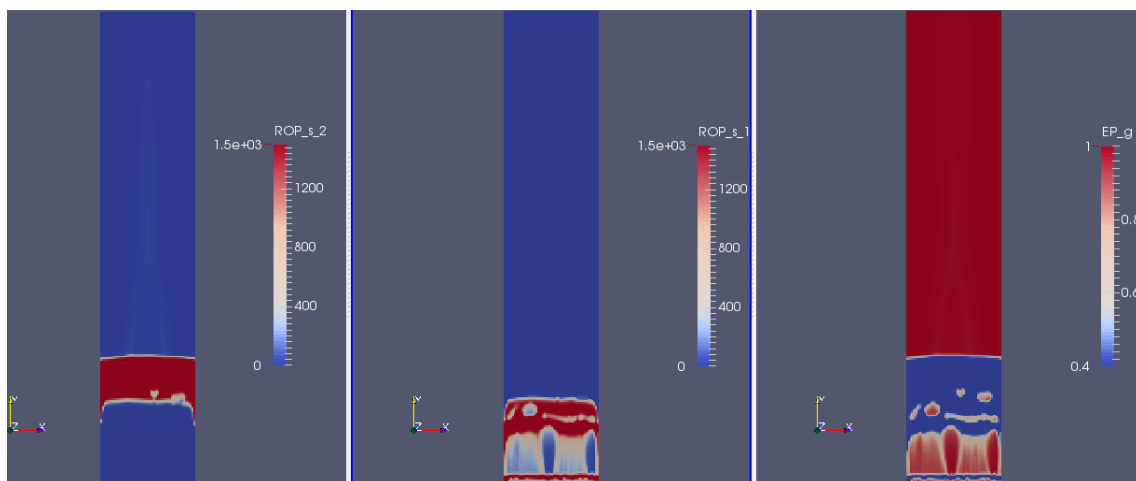


Figura 4.3. Captura simulación $t=0,25$ segundos

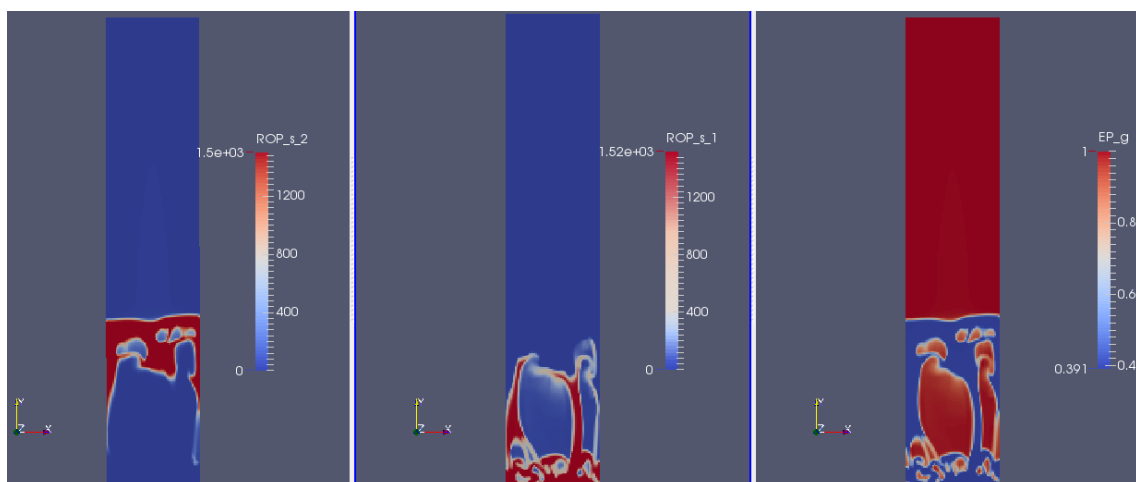


Figura 4.4. Captura simulación $t=0,5$ segundos

4. RESULTADOS

En la Figura 4.5 se aprecia como los sólidos empiezan a mezclar, ya que van apareciendo colores más claros dentro de las masas grandes, pero aunque aún tenemos las dos fases bien diferenciadas. Es a partir de la Figura 4.6, donde las dos fases empiezan a tener la misma forma y el mezclado aumenta, el color rojo oscuro empieza a desaparecer.

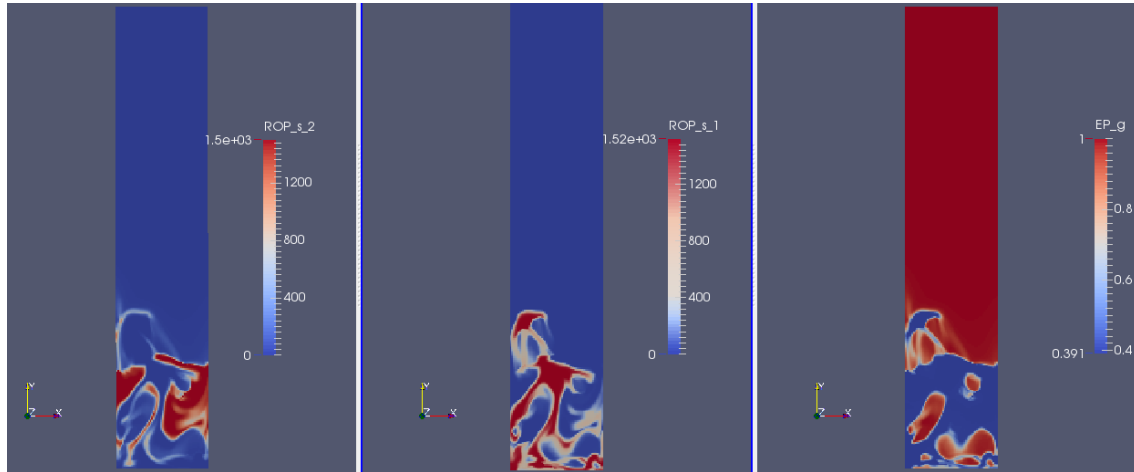


Figura 4.5. Captura simulación $t=1$ segundos

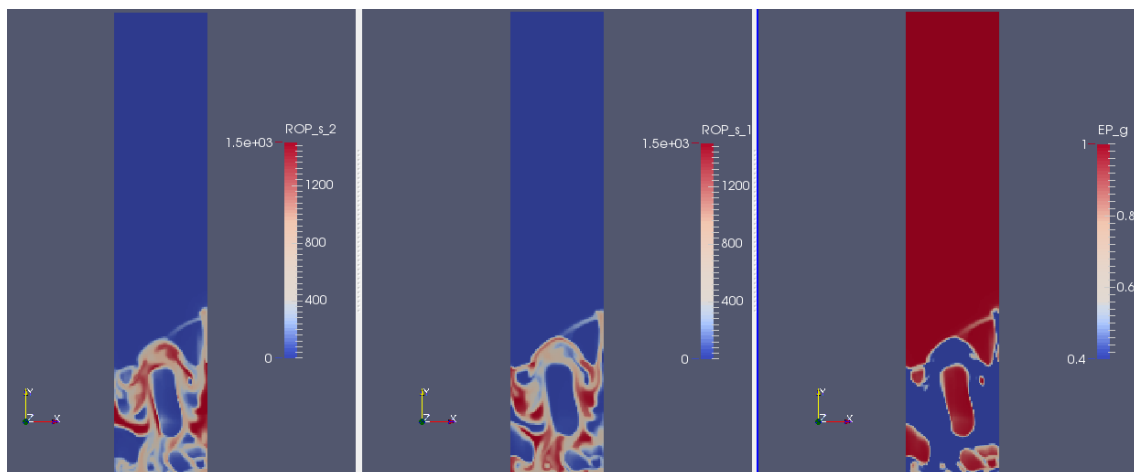


Figura 4.6. Captura simulación $t=1,5$ segundos

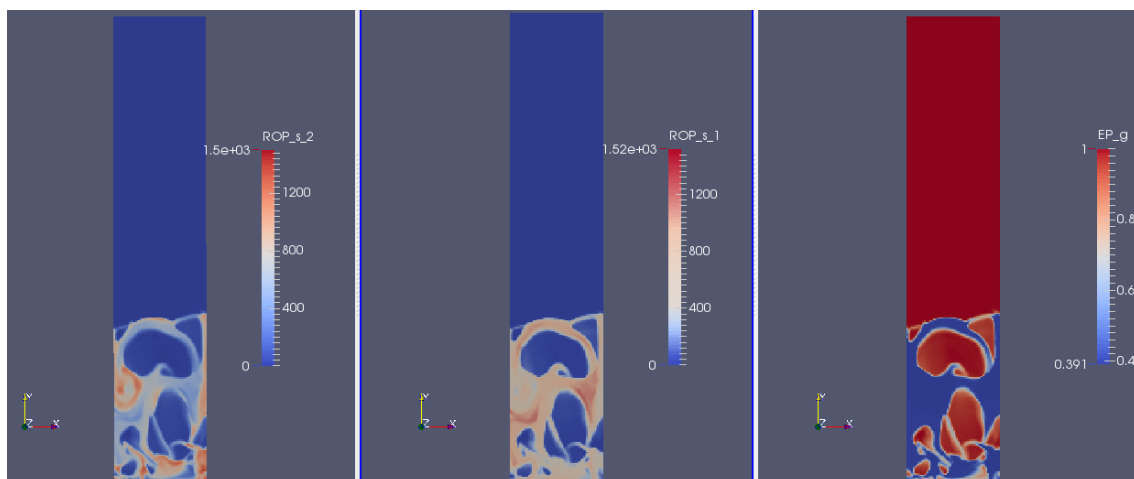


Figura 4.7. Captura simulación $t=2,5$ segundos

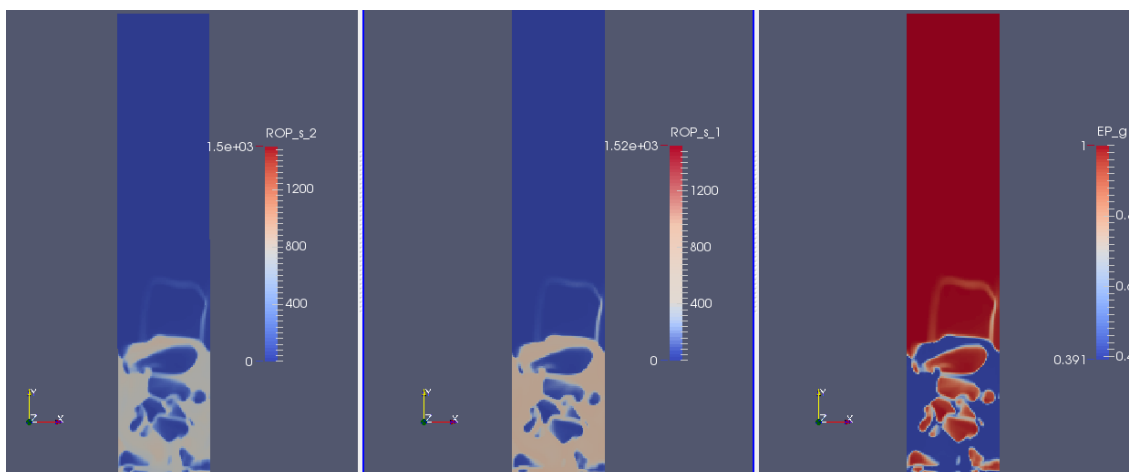


Figura 4.8. Captura simulación $t=5$ segundos

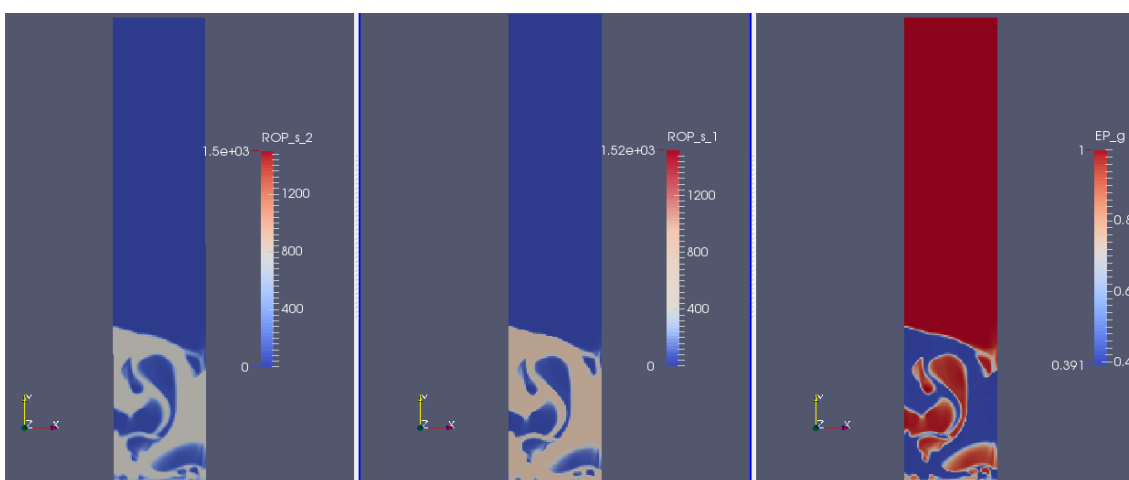


Figura 4.9. Captura simulación $t=10$ segundos

En la figura 4.7 se observa como las dos fases son casi idénticas, lo cual es representativo de un Índice de Mezclado ya elevado, casi desapareciendo por completo las tonalidades rojas en la mezcla. En las Figuras 4.8 y 4.9, la mezcla es completa, solo existe una fase y el Índice de Mezclado será próximo a la unidad.

Índice y tiempos de mezclado

En este apartado se mostrarán los resultados obtenidos del tiempo de mezclado de un lecho fluidizado mediante la utilización de MFIX y Matlab.

Antes de presentar los resultados hay que definir cuál será la condición final con la que se presentarán los resultados, que hemos definido en el código de Matlab. La primera condición que se comprobó es la condición de Lacey [7]. Este método se basa en la varianza de la concentración de partículas de cada color de tal forma que alcance su valor máximo cuando el lecho está perfectamente mezclado y su valor mínimo cuando está completamente segregado (sin mezclar).

Tras realizar el cálculo del índice de mezclado con las condiciones de Lacey, obtenemos unos tiempos de mezclado muy pequeños, del orden de 2 ó 3 veces menores que los tiempos experimentales. Comparándolo también con los resultados obtenidos mediante MFIX, vemos

que en instantes en los que predice que la mezcla ya debería de estar mezclada, se puede apreciar de forma clara que no es así. Por ello, podemos deducir que la condición de Lacey no es adecuada para su empleo en el presente proyecto. Esto puede atribuirse a que el modelo de Lacey está inicialmente concebido para sistemas de modelos discretos (experimentales o DEM) y no para modelos continuos como el de dos fluidos empleado en este proyecto.

Una vez descartado el método de Lacey como método de obtención del tiempo de mezclado, comprobaremos si las condiciones de mezclado que hemos definido en el código de Matlab son correctas.

Para calcular el índice de mezclado, imponemos la condición de que siempre y cuando en una celda la fracción de vacío sea menor que la unidad y la concentración del sólido 1 sea igual a la concentración del sólido 2 multiplicada por una tolerancia, la celda se considerará mezclada. Las tolerancias que vamos a usar son, del $\pm 20\%$ para la condición 1 (IM1 en el código Matlab, Apéndice C), $\pm 10\%$ para la condición 2 (IM2) y $\pm 5\%$ para la condición 3 (IM3)

En la Figura 4.10, podemos ver las tres condiciones para partículas de diámetro 0,5 milímetros y velocidad superficial $U_0 = 2U_{mf}$. Para comprobar cuál de las condiciones es la que más se aproxima a la de la simulación de MFiX, trazaremos una línea recta con el valor medio de la zona de régimen permanente. Se considera régimen permanente a aquel alrededor del cual el índice de mezclado oscila. Estas oscilaciones son ocasionadas por las burbujas presentes en el lecho.

Para obtener los tiempos de mezclado para las tres condiciones, se establece que el tiempo de mezclado es el primer corte de las gráficas con el valor medio de régimen permanente. Una vez obtenidos los tiempos de mezclado de cada una de las condiciones se comparan cualitativamente con los datos obtenidos de mediante MFiX usando el visualizador Paraview (Figura 4.11).

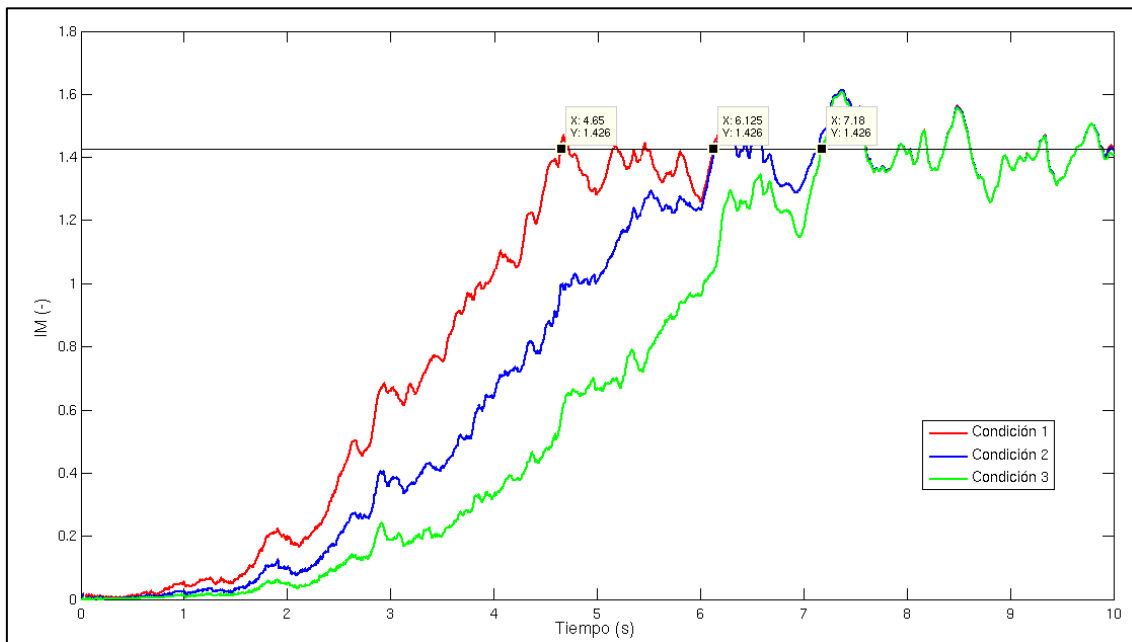


Figura 4.10. Tiempo de mezclado en función del tiempo para las simulaciones de las partículas de $d_p = 0,5$ mm y $U=2U_{mf}$.

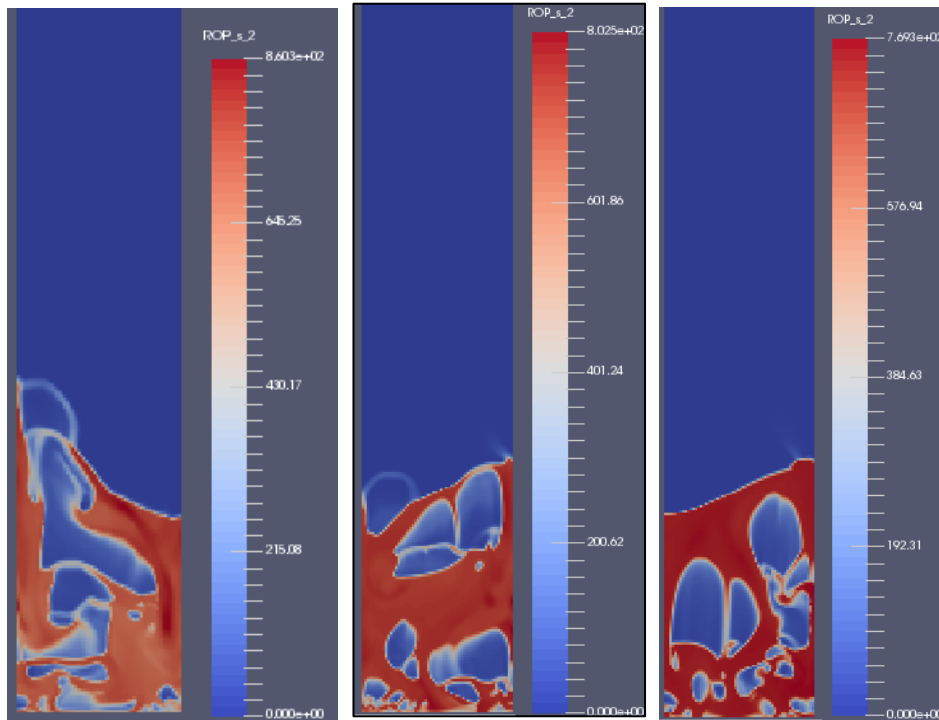


Figura 4.11. Capturas de las simulaciones en MFiX, fase sólida 2. $t=4.65$ s, $t=6.12$ s y $t=7.18$ s. Partículas de $d_p = 0,5$ mm con una velocidad superficial $U=2U_{mf}$.

En la Figura 4.11, vemos como en las dos primeras condiciones el mezclado aun no es completo, ya que existen diferentes tonalidades en la mezcla, por lo que las descartamos ambas. En la ultima captura vemos como la mezcla es practicamente uniforme y además la leyenda nos indica que el valor máximo de la mezcla es 769.3 kg/m^3 , el cual es muy próximo al valor de la mezcla perfecta, 750 kg/m^3 . Por todo ello utilizaremos la condición 3 a lo largo de todo el presente trabajo para la obtención de los tiempos de mezclado.

En la Figura 4.12 se presenta la evolución del mezclado completo para partículas de diámetro de $0,5$ mm. Se acompaña de capturas obtenidas a través del visualizador Paraview de las dos fases sólidas.

Como se observa en la Figura 4.12 el proceso de mezclado se puede dividir en tres tramos bien diferenciados, arranque, evolucion del mezclado y regimen permanente.

En el tramo de arranque, vemos que el proceso de mezclado es lento y presenta una evolucion con una pendiente muy pequeña, casi plana. En las instantáneas obtenidas de Paraview vemos que hasta el segundo 1, que es cuando aproximadamente empiezan a llegar a la parte superior partículas del sólido que se encontraba en la parte inferior, el indice de mezclado es muy cercano a 0. A partir de este punto el índice de mezclado comienza a aumentar de forma muy leve hasta llegar al punto de inflexion que está entre el segundo 1,5 y 2. Este punto de inflexion, donde empezaría el segundo tramo, estaría relacionado con la aparición de grandes grupos de partículas del solido superior en la parte inferior del lecho.

El segundo tramo, al que hemos denominado evolución, comienza con un aumento significativo del índice de mezclado. Este tramo se asemeja a una evolucion parabólica, donde

la pendiente inicial es menor que la final. Este tramo finaliza cuando llega al punto que hemos denominado como tiempo de mezclado. Como se puede observar en la Figura 4.12, en este tramo las dos fases de sólidas se han unido en una sola y vemos el efecto de como se van oscureciendo las capturas tomadas de Paraview, hasta observar una mezcla completamente uniforme.

Una vez superado el punto de tiempo de mezclado, donde empezaría el tramo tres, el proceso entraría en régimen permanente, donde el índice de mezclado fluctúa alrededor de un valor medio.

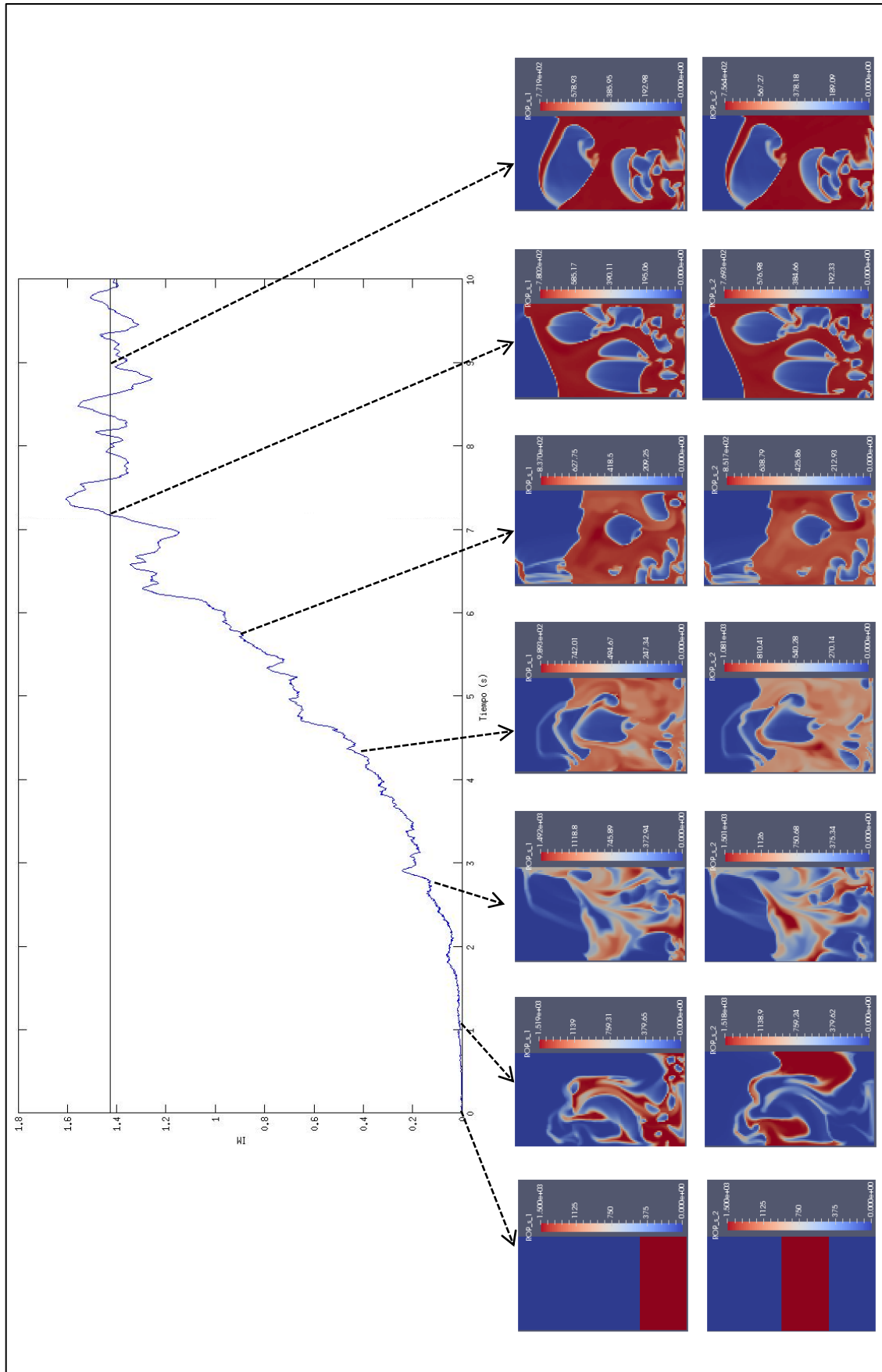


Figura 4.12. Evolución del IM para partículas de $d_p = 0,5$ mm y $V=2V_{mf}$

Tiempo de mezclado y comparación con resultados experimentales

A continuación se muestran los resultados obtenidos mediante el postprocesado de los datos para cada tipo de partícula. En cada una de las imágenes se muestra la evolución del índice de mezclado a diferentes velocidades. También se muestra de forma gráfica el tiempo de mezclado para las distintas velocidades.

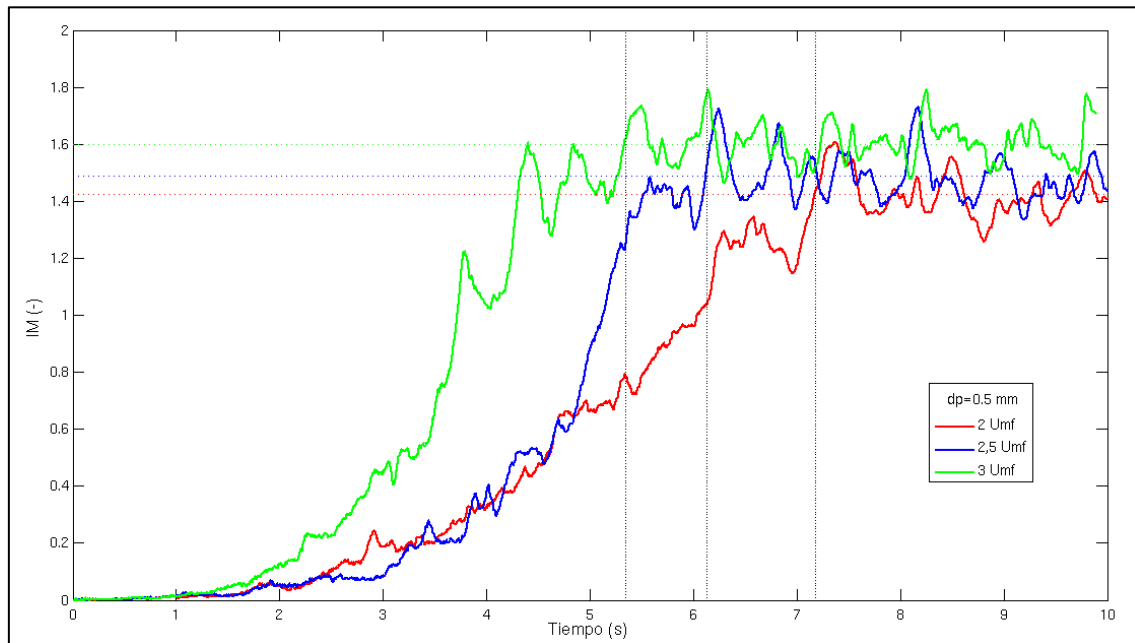


Figura 4.13. Variación de tiempo de mezclado de partículas $d_p = 0,5$ mm en función de la velocidad superficial

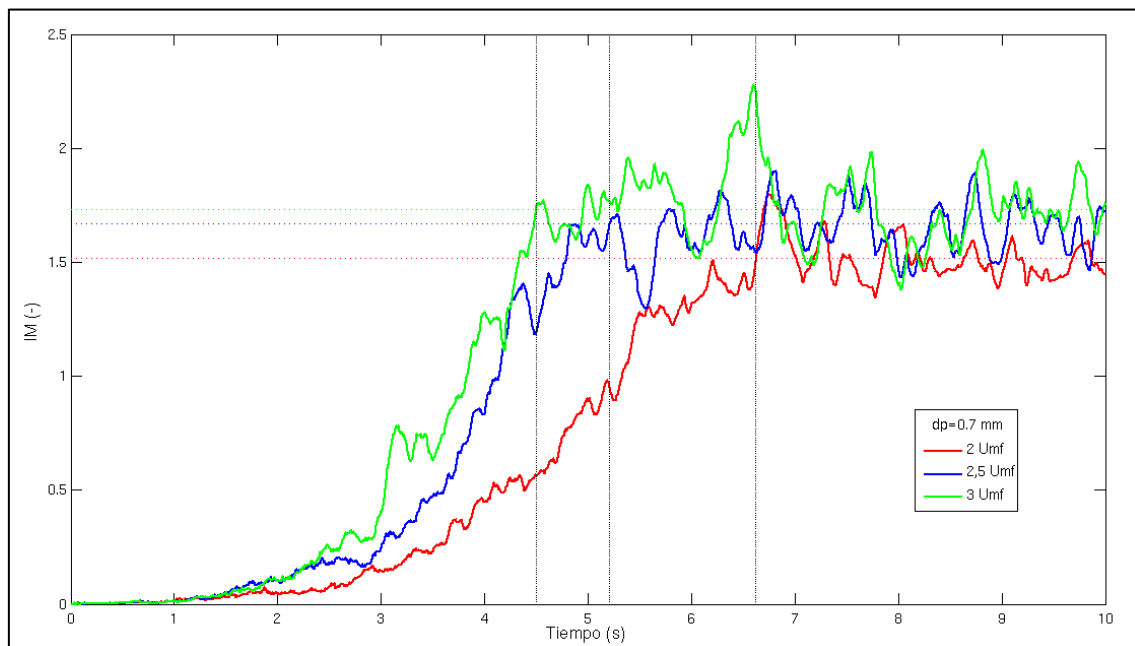


Figura 4.14. Variación de tiempo de mezclado de partículas $d_p = 0,7$ mm en función de la velocidad superficial

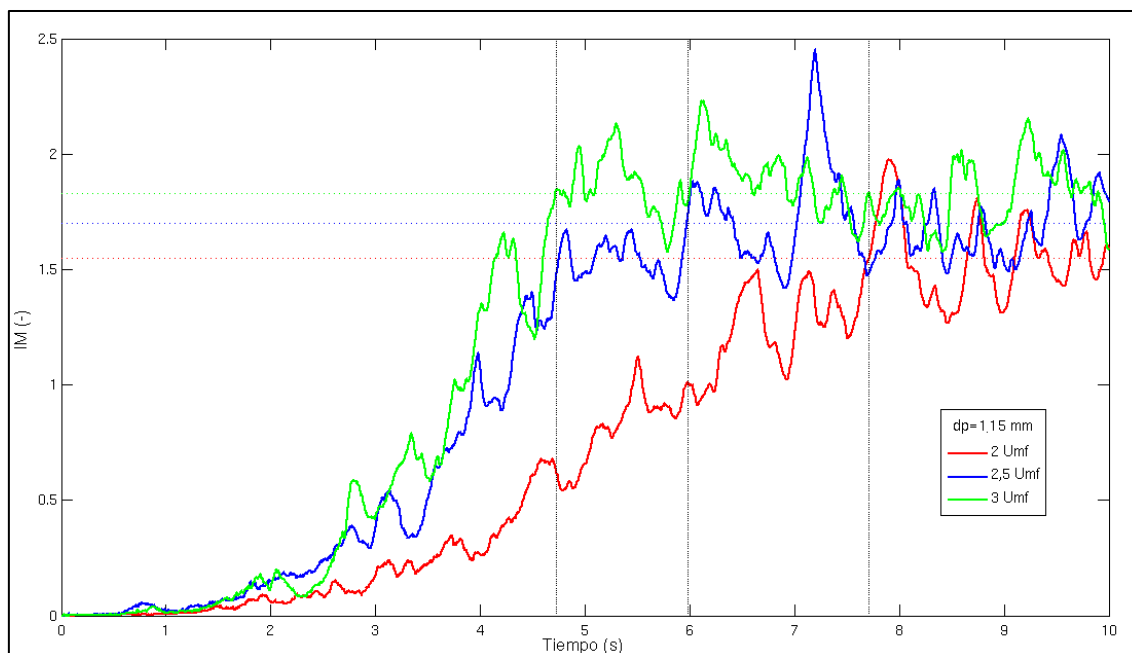


Figura 4.15. Variación de tiempo de mezclado de partículas $d_p = 1,15$ mm en función de la velocidad superficial

Vemos que las simulaciones siguen la misma tendencia para los tres tipos de partículas estudiados, en los cuales se produce un ascenso del índice de mezclado con un perfil no lineal hasta alcanzar un régimen permanente alrededor del cual fluctúa el valor del índice de mezclado. Los tres tramos mencionados en la sección previa pudieron ser visualizados cualitativamente para cada uno de los casos.

Puede observarse en las Figuras 4.13 a 4.15 que al aumentar la velocidad superficial el lecho se expande más, por lo que el valor en régimen permanente del índice de mezclado es mayor a medida que aumenta esta velocidad. Por otro lado, puede observarse como las fluctuaciones en el índice de mezclado son mayores a medida que aumenta el diámetro de partícula debido al mayor tamaño de las burbujas presentes en el sistema.

A continuación se muestra una tabla resumen con los tiempos de mezclado de la simulación y los tiempos de mezclado obtenidos de forma experimental.

Tamaño de partícula, d_p (mm)	Velocidad superficial (m/s)		Tiempo de mezclado (s), simulación	Tiempo de mezclado experimental (s) [2]
0,5	2 U_{mf}	0,54	7,18	9,2
	2,5 U_{mf}	0,675	6,13	8,4
	3 U_{mf}	0,81	5,34	7,7
0,7	2 U_{mf}	0,88	6,62	8,3
	2,5 U_{mf}	1,1	5,21	6,7
	3 U_{mf}	1,32	4,5	6,3
1,15	2 U_{mf}	1,34	7,71	14,2
	2,5 U_{mf}	1,675	5,98	8,4
	3 U_{mf}	2,01	4,725	7,8

Tabla 5. Tabla Resultados. Resumen de los tiempos de mezclados obtenidos mediante simulación y comparativa con los tiempos obtenidos de forma experimental [22]

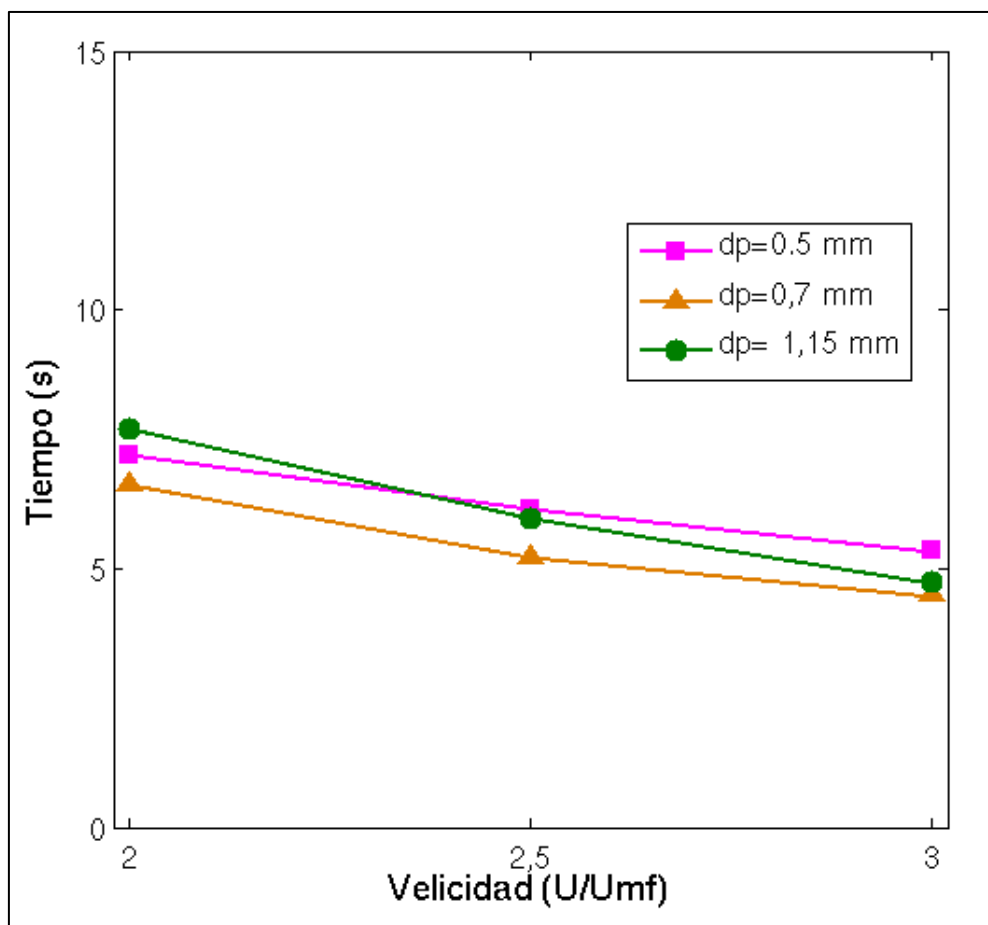


Figura 4.16. Tiempos de mezclado de los tres tipos de partículas en función de las velocidades de fluidización

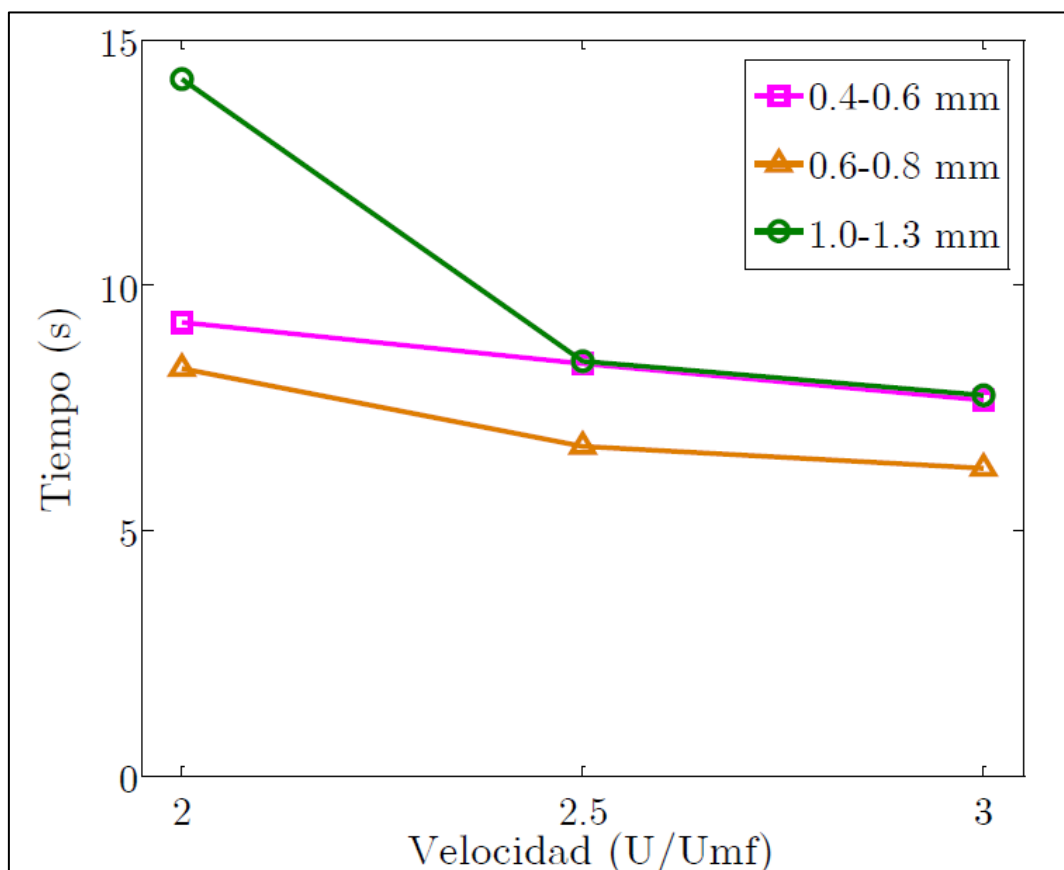


Figura 4.17. Tiempos de mezclado de los tres tipos de partículas en función de las velocidades de fluidización obtenidos de forma experimental [2]

La Figura 4.16 muestra cómo los tiempos de mezclado obtenidos de la simulación disminuyen a medida que aumentamos la velocidad superficial. Esto sucede para los tres tipos de partículas estudiadas. A medida que la velocidad superficial es más grande, tendremos un burbujeo más vigoroso. Esto hace que la cantidad de partículas arrastradas por las burbujas aumente, lo que provoca un mezclado más rápido. Comparando los resultados numéricos (Figura 4.16) con los experimentales (Figura 4.17) puede observarse como esa tendencia descendente de los tiempos de mezclado con la velocidad superficial es correctamente reproducida por la simulación. Asimismo, resulta interesante como la simulación también es capaz de predecir que el tiempo menor de mezclado tiene lugar para las partículas medianas (0.7 mm). El hecho de que las partículas de 0.7 mm se mezclen más rápido que las de 1.15 mm puede ser atribuido a que, para ratios de velocidades superficiales similares (U/U_{mf}), las partículas medianas presentarán menores burbujas pero más numerosas, lo que ocasiona un mayor arrastre de partículas y un menor tiempo de mezclado. Sin embargo, esta tendencia parece no mantenerse para las partículas pequeñas debido a su menor tamaño y por lo tanto mayor cantidad, por lo que será más dificultoso mezclarlas. Si comparamos los tiempos de mezclado de las partículas grandes (1.15 mm) con las pequeñas (0.5 mm), podemos observar como para velocidades superficiales pequeñas ($2 U_{mf}$), las partículas grandes presentan un tiempo de mezclado superior. Esto puede ser atribuido a las mayores burbujas presentes en los casos con partículas grandes. Sin embargo, esta tendencia se invierte para velocidades

superficiales superiores posiblemente debido a que, una vez las burbujas son suficientemente grandes como para que el mezclado por burbujeo sea equivalente, las partículas pequeñas, al ser más numerosas, presentan una dificultad mayor para ser mezcladas.

Por otro lado, se puede observar en las Figuras 4.16 y 4.17 que existe una diferencia entre los tiempos de la simulación y los tiempos obtenidos de forma experimental. La reducción de los tiempos en las simulaciones se puede deber al efecto pared [19], ya que en la simulación sí que es verdaderamente bidimensional, mientras que en el experimental la fricción de las partículas con las paredes frontal y trasera puede limitar su movimiento, ocasionando un tiempo de mezclado mayor.

De la comparación de los resultados podemos ver que las partículas de tamaños medianos (0.7 mm de diámetro), se comportan de forma similar tanto en la simulación como en el proceso experimental. En cambio en las partículas pequeñas (0.5 mm) y grandes (1.15 mm) el comportamiento no es el mismo. En el experimental en ninguno de los tres experimentos las partículas grandes mezclan antes que las más pequeñas, en cambio en las simulaciones el comportamiento a la velocidad más baja es el mismo, pero en las otras dos mezcla más rápido. Como ya se mencionó antes, estas diferencias de comportamiento pueden ser atribuidas a la bidimensionalidad del modelo computacional mientras que en los experimentos la fricción de las partículas con las paredes frontal y trasera desempeña un papel importante.

5. CONCLUSIONES Y TRABAJOS FUTUROS

En el presente proyecto, se ha llevado a cabo un estudio de simulación numérica del mezclado de un lecho bidimensional. Se ha estudiado la influencia que ejercen el diámetro de las partículas y la velocidad superficial en el tiempo de mezclado. Una vez obtenidos los resultados de las simulaciones, se compararon con los resultados experimentales obtenidos en un trabajo previo.

Para la realización del proyecto se han utilizado dos programas, MFiX y Matlab. Con el primero de ellos se ha realizado las simulaciones del lecho, obteniendo los resultados cualitativos de estudio. Con Matlab se ha realizado el postprocesado de los datos y con ello se ha calculado el tiempo de mezclado para los diferentes casos de estudio.

De los resultados obtenidos podemos destacar que tanto en los resultados experimentales como en los obtenidos mediante simulación, se mantiene siempre una tendencia decreciente en los tiempos de mezclado cuando se aumenta la velocidad superficial.

También cabe destacar que los tiempos de mezclado obtenidos en las simulaciones son sustancialmente menores que en los experimentales. Esto se puede achacar al efecto pared, debido al cual las partículas friccionan contra las paredes frontal y trasera pudiendo limitar así su movimiento y por tanto ocasionando un tiempo de mezclado mayor. En cambio, en el proceso numérico esto no sucede, ya que las simulaciones son verdaderamente bidimensionales.

Tras la realización de las simulaciones y su comparación con los resultados experimentales, podemos decir que, de las partículas empleadas, las de un tamaño intermedio son las que mejor mezclan, ya que tanto en la simulación como en los ensayos experimentales, para cualquier velocidad superficial el tiempo de mezclado de las partículas medias es claramente menor. De las partículas pequeñas y grandes podemos decir que a velocidades pequeñas la simulación predice bien lo que sucede en el ensayo experimental, pero cuando aumentamos la velocidad superficial se invierten los resultados y las partículas grandes llegan a mezclar antes que las pequeñas, cosa que no sucede nunca en el experimental.

De acuerdo con los resultados obtenidos en este proyecto, como posibles trabajos futuros se propone:

- Realizar más experimentos para partículas de distintos tamaños con un muestreo de velocidades superficiales mayor para poder estudiar mejor las tendencias para velocidades en rangos intermedios.
- Realizar los experimentos con distintas configuraciones iniciales de colocación de las partículas. Como podría ser colocar cada grupo de las partículas en varias capas horizontales paralelas o colocar cada grupo de partículas en capas verticales, separadas por membranas las cuales se retirarían en el momento previo a iniciar el ensayo.
- Intentar simular y hacer experimentos de tiempos de mezclado para lechos ya en régimen burbujeante (eliminando el efecto transitorio del arranque), y así poder evitar efectos transitorios iniciales.

- Otro caso interesante de estudiar sería el de realizar simulaciones tridimensionales en las que se considere el efecto de las paredes frontal y trasera. Una de las limitaciones de este punto sería su elevado coste computacional, pero podría facilitar información muy valiosa a la hora de evaluar la importancia de estas paredes en procesos de mezclado.
- Otro posible trabajo futuro sería concebir un método de cálculo más robusto para el cálculo del índice de mezclado, el cual sea capaz de absorber mejor las fluctuaciones causadas por la expansión y el burbujeo del lecho y que además pueda ser usado tanto para sistemas discretos como continuos.
- También sería interesante ajustar en la simulación el exceso de aire del experimento. Es decir, en lugar de poner la velocidad del experimento, medir U_{mf} en experimento y simulación y utilizar el mismo ratio U/U_{mf} .

APENDICES

APENDICE A

ECUACIONES DE GOBIERNO Y MODELOS

En este apéndice se muestran las ecuaciones de gobierno y los modelos que han sido utilizados por MFIX en las simulaciones

A1 ECUACIONES DE GOBIERNO

Ecuación de continuidad para la fase sólida:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_p \rho_p) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\varepsilon_p \rho_p Y_{pi}) = 0$$

Ecuación de continuidad para la fase gaseosa:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_g \rho_g) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\varepsilon_g \rho_g Y_{gi}) = 0$$

donde:

$$(\varepsilon_p + \varepsilon_g) = 1$$

Ecuación de balance de momento para la fase sólida:

$$\left[\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_p \rho_p U_{pi}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\varepsilon_p \rho_p U_{pj} Y_{pi}) \right] = -\varepsilon_p \frac{\partial P_p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{pij}}{\partial x_j} + I_{gpi} + \varepsilon_p \rho_p g_p$$

Ecuación de balance de momento para la fase gaseosa:

$$\left[\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_g \rho_g U_{gi}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\varepsilon_g \rho_g U_{gj} Y_{gi}) \right] = -\varepsilon_g \frac{\partial P_g}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{gij}}{\partial x_j} + I_{gpi} + f_{gi} + \varepsilon_p \rho_p g_p$$

Ecuación granular de temperatura para la fase sólida:

$$\frac{3}{2} \rho_p \left[\frac{\partial \varepsilon_p \Theta_p}{\partial t} + \frac{\partial \varepsilon_p U_{pj} \Theta_p}{\partial x_j} \right] = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(k_p \frac{\partial \Theta_p}{\partial x_i} \right) + \tau_{pij} \frac{\partial U_{pi}}{\partial x_j} + \Pi_p - \varepsilon_p \rho_p J_p$$

A2 Estrés por fricción

El modelo de fricción Schaeffer se utilizará cuando la fracción de volumen de sólidos supera el límite máximo de empaquetamiento ε^*

$$P_c = \begin{cases} 10^{24}(\varepsilon^* - \varepsilon_g)^{10}, & \varepsilon_g < \varepsilon^* \\ 0, & \varepsilon_g \geq \varepsilon^* \end{cases}$$

$$\mu_f = \begin{cases} \min\left(\frac{P_c \sin(\phi)}{\sqrt{4I_{2D}}}, \mu_s^{max}\right), & \varepsilon_g < \varepsilon^* \\ 0, & \varepsilon_g \geq \varepsilon^* \end{cases}$$
$$\mu_s^{max} = 100$$

El tensor de desviación de segundo orden se define como:

$$I_{2D} = \frac{1}{6} \left[(D_{s,11} - D_{s,22})^2 + (D_{s,22} - D_{s,33})^2 + (D_{s,33} - D_{s,11})^2 \right] + D_{s,12}^2 + D_{s,23}^2 + D_{s,31}^2$$

donde

$$D_{s,ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_{s,i}}{\partial x_j} + \frac{\partial u_{s,j}}{\partial x_i} \right)$$

Modelos constitutivos de la ecuación del momento del gas

$$\tau_{gij} = 2\mu_{gt} S_{gij}$$

$$S_{gij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial U_{g,i}}{\partial x_j} + \frac{\partial U_{g,j}}{\partial x_i} \right) - \frac{1}{3} \frac{\partial U_{g,i}}{\partial x_i}$$

$$\mu_{gt} = \min(\mu_{max}, \mu_g + \mu_e)$$

$$\mu_e = 2l_p^2 \varepsilon_g \rho_g \sqrt{I_{2Dg}}$$

Definiendo el tensor de desviación de segundo orden como:

$$I_{2Dg} = \frac{1}{6} \left[(D_{g,11} - D_{g,22})^2 + (D_{g,22} - D_{g,33})^2 + (D_{g,33} - D_{g,11})^2 \right] + D_{g,12}^2 + D_{g,23}^2 + D_{g,31}^2$$

A3 INTERCAMBIO DE MOMENTO EN LA INTERFASE

Gas/solid intercambio de momento en la interfase:

$$I_{pgi} = K_{pg}(u_{gi} - u_{pi})$$

Función de arrastre de Gidaspow:

$$K_{gp} = \begin{cases} \frac{3}{4} C_D \frac{\varepsilon_p \rho_p \varepsilon_g |\vec{u}_g - \vec{u}_p|}{d_p} \varepsilon_g^{-2.65} & \varepsilon_g \geq 0.8 \\ 150 \frac{\varepsilon_p^2 \mu_g}{\alpha_g d_p^2} + 1.75 \frac{\varepsilon_p \rho_p |\vec{u}_g - \vec{u}_p|}{d_p} & \varepsilon_g < 0.8 \end{cases}$$

Donde el coeficiente de arrastre:

$$C_D = \begin{cases} \frac{24}{Re} (1 + 0.15 Re^{0.687}) & Re < 1000 \\ 0.44 & Re \geq 1000 \end{cases}$$

y donde el número de Reynolds de la partícula:

$$Re = \frac{\varepsilon_g \rho_g |\vec{u}_g - \vec{u}_p| d_p}{\mu_g}$$

A4 TEORÍA CINÉTICA

La teoría cinética del flujo granular se emplea en las ecuaciones.

Tensiones sólidos:

$$\tau_p = \left(-P_s + \eta \mu_b \frac{\partial U_{pi}}{\partial x_i} \right) \delta_{ij} + 2\mu_p S_{pij}$$

donde

$$S_{pij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial U_{pi}}{\partial x_j} + \frac{\partial U_{pj}}{\partial x_i} \right) - \frac{1}{3} \frac{\partial U_{pi}}{\partial x_i}$$

Función de distribución radial de contacto:

$$g_0 = \frac{1}{1 - \left(\frac{\varepsilon_p}{\varepsilon_{p,max}} \right)^{\frac{1}{3}}}$$

Presión de sólidos:

$$P_p = \varepsilon_p \rho_p \Theta_p [1 + 4\eta \varepsilon_p g_{0,pp}]$$

Viscosidad de sólidos:

$$\mu_p = \left(\frac{2 + \alpha}{3}\right) \left[\frac{\mu_p^*}{g_{0,pp} \eta (2 - \eta)} \left(1 + \frac{8}{5} \eta \varepsilon_p g_{0,pp}\right) \left(1 + \frac{8}{5} \eta (3\eta - 2) \varepsilon_p g_{0,pp}\right) + \frac{3}{5} \eta \mu_b \right]$$

donde

$$\mu_p^* = \frac{\rho_p \varepsilon_p g_{0,pp} \Theta_p \mu}{\rho_p \varepsilon_p g_{0,pp} \Theta_p + \left(\frac{2K_{gp}\mu}{\rho_p \varepsilon_p}\right)}$$

$$\mu = \frac{5}{96} \rho_p d_p \sqrt{\pi \Theta_p}$$

y la viscosidad de la fase densa es:

$$\mu_b = \frac{256}{5\pi} \mu \varepsilon_p^2 g_{0,pp}$$

Conductividad de sólidos:

$$k_p = \left(\frac{k_p^*}{g_{0,pp}}\right) \left[\left(1 + \frac{12}{5} \eta \varepsilon_p g_{0,pp}\right) \left(1 + \frac{12}{5} \eta^2 (4\eta - 3) \varepsilon_p g_{0,pp}\right) + \frac{64}{25\pi} (41 - 33\eta) \eta^2 (\varepsilon_p g_{0,pp})^2 \right]$$

donde

$$k_p^* = \frac{\rho_p \varepsilon_p g_{0,pp} \Theta_p k}{\rho_p \varepsilon_p g_{0,pp} \Theta_p + \frac{6K_{gp}k}{5\rho_p \varepsilon_p}}$$

$$k = \frac{75\rho_p d_p \sqrt{\pi \Theta_p}}{48\eta (41 - 33\eta)}$$

Disipación por colisión

$$J_m = \frac{48}{\sqrt{\pi}} \eta (1 - \eta) \frac{\varepsilon_p g_{0,pp}}{d_p} \Theta_p^{\frac{3}{2}}$$

$$\eta = \frac{1 + e}{2}$$

Términos de intercambio:

$$\Pi_p = -3K_{gp} \Theta_p + \frac{81\varepsilon_p \mu_g^2 |\vec{u}_g - \vec{u}_p|^2}{g_{0,pp} d_p^3 \rho_p \sqrt{\pi \Theta_p}}$$

APENDICE B

ARCHIVO DE ENTRADA MFiX

A continuación se presenta el documento de entrada de MFiX completo utilizado para realizar las simulaciones. Todas las propiedades están expresadas en sus unidades correspondientes en el sistema internacional.

! Fluidized Bed

! BUB01

! RUN-CONTROL SECTION

RUN_NAME	= 'BUB01'	! Nombre del output files
DESCRIPTION	= 'fluid bed'	! Descripción
RUN_TYPE	= 'restart_1'	! Normal restart run, desde .RES file
UNITS	= 'SI'	! Unidades en el Sistema Internacional
TIME	= 0.0	! Start time
TSTOP	= 30.0	! Stop time
DT	= 0.5E-5	! Tiempo de paso
DT_max	= 0.5E-3	! Tiempo de paso máximo
DT_min	= 5e-10	! Tiempo de paso Mínimo
ENERGY_EQ	= .FALSE.	! No resuelve la ecuación de la energía
SPECIES_EQ	= .FALSE. .FALSE. .FALSE.	! No resuelve ecuaciones de especie
GRANULAR_ENERGY	= .TRUE.	! Resuelve Ec. Energ. granular completa
AUTO_RESTART	= .TRUE.	! Reinicio automático en caso de error

! GEOMETRY SECTION

COORDINATES	= 'cartesian'	! Ejes cartesianos
XLENGTH	= 0.3	! Ancho del lecho

IMAX	= 60	! Celdas en dirección i
YLENGTH	= 1.5	! Altura lecho
JMAX	= 300	! Celdas en dirección j
NO_K	= .TRUE.	! 2D, no dirección k

! GAS-PHASE SECTION

RO_g0	= 1.22	! Densidad del gas
MU_g0	= 1.8E-5	! Viscosidad del gas

! SOLIDS-PHASE SECTION

MMAX	= 2	! Numero de fases sólidas
RO_s(1)	= 2500	! Densidad sólido 1
RO_s(2)	= 2500	! Densidad sólido 2
D_p0(1)	= 0.0005	! Diámetro partícula 1
D_p0(2)	= 0.0005	! Diámetro partícula 2
E	= 0.9	! Coeficiente de restitución
e_w	= 0.9	! Coeficiente de restitución de ! partículas de las paredes
Phi	= 30	! Angulo de fricción interna en grados
Phi_w	= 30	! Angulo de fricción interna para las ! paredes en grados
EP_star	= 0.4	! Fracción de vacío para mínima ! fluidización
C_f	= 0.1	! Coeficiente fricción entre partículas ! de dos sólidos diferentes
DRAG_TYPE	= 'GIDASPOW'	! Establecer modelo de arrastre de ! sólidos

PHIP = 0.6

! Coeficiente de especularidad

! INITIAL CONDITIONS SECTION

! 1. bed

! $0 < x < 0.3, 0 < y < 0.15$

IC_X_w(1) = 0.0

! Extremo oeste del lecho

IC_X_e(1) = 0.3

! Extremo este del lecho

IC_Y_s(1) = 0.0

! Extremo sur del lecho

IC_Y_n(1) = 0.15

! Extremo norte del lecho

IC_EP_g(1) = 0.4

! Fracción de vacío

IC_ROP_s(1,1) = 1500

! Densidad aparente inicial del

! sólido 1, $ro_s*ep_s==2500*0.6$

IC_ROP_s(1,2) = 0

! Densidad aparente sólido 2

IC_U_g(1) = 0.0

! Velocidad radial del gas

IC_V_g(1) = 0.27

! Velocidad axial del gas

IC_U_s(1,1) = 0.0

! Velocidad radial del sólido

IC_V_s(1,1) = 0.0

! Velocidad axial del sólido

IC_Theta_m(1,1) = 100

! Temperatura inicial del sólido fase-1

! en la región de IC 1

IC_Theta_m(1,2) = 100

! Temperatura inicial del sólido fase-2

! en la región de IC 1

IC_X_g(1, 1) = 1

! Fracción de masa inicial de especies

! de gas n.

IC_X_s(1, 1, 1) = 1

! Fracción de masa inicial de sólidos de

! fase m, especies n.

! 2. bed

! $0 < x < 0.3, 0.15 < y < 0.3$

IC_X_w(2) = 0.0

! Extremo oeste del lecho

IC_X_e(2) = 0.3

! Extremo este del lecho

IC_Y_s(2)	= 0.15	! Extremo sur del lecho
IC_Y_n(2)	= 0.3	! Extremo norte del lecho
IC_EP_g(2)	= 0.4	! Fracción de vacío
IC_ROP_s(2,1)	= 0	! Densidad aparente sólido 1
IC_ROP_s(2,2)	= 1500	! Densidad aparente inicial del ! sólido 2, $ro_s*ep_s=2500*0.6$
IC_U_g(2)	= 0.0	! Velocidad radial del gas
IC_V_g(2)	= 0.27	! Velocidad axial del gas
IC_U_s(2,2)	= 0.0	! Velocidad radial del sólido
IC_V_s(2,2)	= 0.0	! Velocidad axial del sólido
IC_Theta_m(2,1)	= 100	! Temperatura inicial del sólido fase-1 ! en la región de IC 2
IC_Theta_m(2,2)	= 100	! Temperatura inicial del sólido fase-2 ! en la región de IC 2
IC_X_g(2, 1)	= 1	! Fracción de masa inicial de especies ! de gas n
IC_X_s(2, 2, 1)	= 1	! Fracción de masa inicial de sólidos de ! fase m, especies n.

! 3. Freeboard

! $0 < x < 0.3$, $0.3 < y < 1.5$

IC_X_w(3)	= 0.0	! Extremo oeste del Freeboard
IC_X_e(3)	= 0.3	! Extremo oeste del Freeboard
IC_Y_s(3)	= 0.3	! Extremo oeste del Freeboard
IC_Y_n(3)	= 1.5	! Extremo oeste del Freeboard
IC_EP_g(3)	= 1.0	! Fracción de vacío
IC_U_g(3)	= 0.0	! Velocidad radial del gas
IC_V_g(3)	= 0.27	! Velocidad axial del gas

IC_U_s(3,1)	= 0.0	! Velocidad radial del sólido
IC_V_s(3,1)	= 0.0	! Velocidad axial del sólido
IC_X_g(3,1)	= 1.0	! ! Fracción de masa inicial de especies ! de gas n

! BOUNDARY CONDITIONS SECTION

! 1. Input

0 < x < 0.3, y = 0

BC_X_w(1)	= 0.0	! Extremo oeste de la entrada
BC_X_e(1)	= 0.3	! Extremo este de la entrada
BC_Y_s(1)	= 0.0	! Extremo sur de la entrada
BC_Y_n(1)	= 0.0	! Extremo norte de la entrada
BC_TYPE(1)	= 'MI'	! Tipo contorno: Mass inflow
BC_T_g(1)	= 298	! Temperatura de la fase de gas en el ! plano de BC
BC_EP_g(1)	= 1.0	! Fracción de vacío en el plano de BC
BC_U_g(1)	= 0.0	! Componente x velocidad del gas BC
BC_V_g(1)	= 0.54	! Componente Y velocidad del gas BC
BC_P_g(1)	= 1.0794E5	! Presión del gas en el plano BC

! 2. Exit

! 0 < x < 0.3, y = 1.5

BC_X_w(2)	= 0.0	! Extremo oeste de la salida
BC_X_e(2)	= 0.3	! Extremo este de la salida
BC_Y_s(2)	= 1.5	! Extremo sur de la salida
BC_Y_n(2)	= 1.5	! Extremo norte de la salida
BC_TYPE(2)	= 'PO'	! Tipo contorno: Pressure Outflow
BC_P_g(2)	= 1.013E5	! Presión del gas en el plano BC

! 3. Left Wall

BC_X_w(3)	= 0.0
BC_X_e(3)	= 0
BC_Y_s(3)	= 0
BC_Y_n(3)	= 1.5
BC_TYPE(3)	= 'NSW'
BC_Uw_g(3)	= 0.
BC_Vw_g(3)	= 0.
BC_Uw_s(3,1)	= 0.
BC_Vw_s(3,1)	= 0.
BC_Uw_s(3,2)	= 0.
BC_Vw_s(3,2)	= 0.
BC_JJ_PS(3)	= 1

! x = 0

! Extremo oeste de la pared izquierda
! Extremo este de la pared izquierda
! Extremo sur de la pared izquierda
! Extremo norte de la pared izquierda
! Tipo contorno: No Slip Wall
! Uw fase gas deslizamiento parcial
! Vw fase gas deslizamiento parcial
! Uw sólido 1 deslizamiento parcial
! Vw sólido 1 deslizamiento parcial
! Uw sólido 2 deslizamiento parcial
! Vw sólido 2 deslizamiento parcial
! Johnson and Jackson partial slip for
! solids

!4. Right Wall

BC_X_w(4)	= 0.3
BC_X_e(4)	= 0.3
BC_Y_s(4)	= 0
BC_Y_n(4)	= 1.5
BC_TYPE(4)	= 'NSW'
BC_Uw_g(4)	= 0.
BC_Vw_g(4)	= 0.
BC_Uw_s(4,1)	= 0.
BC_Vw_s(4,1)	= 0.
BC_Uw_s(4,2)	= 0.
BC_Vw_s(4,2)	= 0.

! x = 0.3

! Extremo oeste de la pared derecha
! Extremo este de la pared derecha
! Extremo sur de la pared derecha
! Extremo norte de la pared derecha
! Tipo contorno: No Slip Wall
! Uw fase gas deslizamiento parcial
! Vw fase gas deslizamiento parcial
! Uw sólido 1 deslizamiento parcial
! Vw sólido 1 deslizamiento parcial
! Uw sólido 2 deslizamiento parcial
! Vw sólido 2 deslizamiento parcial

BC_JJ_PS(4) = 1 ! Johnson & Jackson deslizamiento
parcial para sólidos.

!OUTPUT CONTROL

OUT_DT = 10. ! Escribe en BUB01.OUT cada 10s

RES_DT = 0.002 ! Escribe archivo de reinicio BUB01.RES
! cada 0.01 s

NLOG = 25 ! Escribe BUB01.LOG cada 25 pasos de
! tiempo

FULL_LOG = .TRUE. ! Visualización residual en pantalla

MAX_INLET_VEL_FAC = 10000

!SPX_DT determina con qué frecuencia se escriben los archivos SPx. BUB01.SP1, el cual contiene la fracción de vacío (EP_g), se escribe cada 0.01 s, BUB01.SP2, el cual contiene las presiones del gas y del sólido (P_g, P_star), se escribe cada 0.1 s.

! EP_g	P_g	U_g	U_s	ROP_s	T_g	X_g		
!	P_star	V_g	V_s		T_s	X_s	Theta	Escalar
!		W_g	W_s					

SPX_DT = 0.005 0.005 0.005 0.005 0.005 100. 100. 100. 100.

! Descomposición en las direcciones I, J y K

NODESI = 4 NODESJ = 2 NODESK = 1

!Sweep Direction

LEQ_SWEEP(1) = 'ISIS' ! Presión de gas

LEQ_SWEEP(2) = 'ISIS' ! Fracción de volumen de sólido

LEQ_SWEEP(3) = 'ISIS' ! Momento del gas y sólido u

LEQ_SWEEP(4) = 'ISIS' ! Momento del gas y sólido v

LEQ_SWEEP(5) = 'ISIS'	! Momento del gas y sólido w
LEQ_SWEEP(6) = 'ISIS'	! Temperatura
LEQ_SWEEP(7) = 'ISIS'	! Fracción de masa de especies
LEQ_SWEEP(8) = 'ISIS'	! Temperatura granular
LEQ_SWEEP(9) = 'ISIS'	! escalar definido por usuario
LEQ_IT(1) = 50	! Presión de gas
LEQ_IT(2) = 50	! Fracción de volumen de sólido
LEQ_IT(3) = 50	! Momento del gas y sólido u
LEQ_IT(4) = 50	! Momento del gas y sólido v
LEQ_IT(5) = 50	! Momento del gas y sólido w
LEQ_IT(6) = 50	! Temperatura
LEQ_IT(7) = 50	! Fracción de masa de especies
LEQ_IT(8) = 50	! Temperatura granular
LEQ_IT(9) = 50	! escalar definido por usuario
 !Discretization	
DISCRETIZE(1) = 2	! Presión de gas
DISCRETIZE(2) = 2	! Fracción de volumen de sólido
DISCRETIZE(3) = 2	! Momento del gas y sólido u
DISCRETIZE(4) = 2	! Momento del gas y sólido v
DISCRETIZE(5) = 2	! Momento del gas y sólido w
DISCRETIZE(6) = 2	! Temperatura
DISCRETIZE(7) = 2	! Fracción de masa de especies
DISCRETIZE(8) = 2	! Temperatura granular
DISCRETIZE(9) = 2	! escalar definido por usuario
 TOL_RESID = 5E-3	 ! Residual máxima a la convergencia

TOL_RESID_Th = 5E-3

! (continuidad+momento)

! Residual máxima a la convergencia

! (Energía granular)

APENDICE C

CÓDIGO MATLAB

% % % SCRIPT PARA EL CÁLCULO DEL ÍNDICE DE MEZCLADO EN UN LECHO FLUIDIZADO

% Se borran las variables abiertas.

clc; clear all;

% Se inicializan las variables.

k=1;

C=zeros(300,60);

D=zeros(300,60);

density_1=2500;

% Como los el archivo creado por Matlab era muy grande, se dividió en 20 partes, cada una de las particiones realizadas contiene 0,5 segundos de la simulación. Con la funciones num2str() conseguimos llamar a las distintas particiones y con la función dlmread las cargamos.

for x=1:20;

if x<11

X=['x0' num2str(x-1)]

Y=['y0' num2str(x-1)]

elseif x>=11

X=['x' num2str(x-1)]

Y=['y' num2str(x-1)]

end

EPG=dlmread(X, ",0,0);

ROP_S1=dlmread(Y, ",0,0);

n_ts=0;

% Para facilitar el cálculo computacional, vamos a realizar los cálculos para cada uno de los archivos, ya que cargarlos todos a la vez lleva mucho más tiempo. Por cada paso de tiempo calculamos el índice de mezclado para el lecho

% A continuación calcularemos para cada instante de tiempo, para cada celda la fracción de vacío (C) y la densidad relativa del sólido 1 (D). Al realizar el postprocesado de MFiX, este no proporciona la información de la siguiente manera, por cada instante de tiempo va haciendo barridos de abajo arriba, y por cada fila (300), nos da la información de las columnas (60). Tenemos que tener en cuenta que MFiX nos creaba un mallado de 302x62, por lo que al cargar los datos debemos saltarnos esos valores. Por ello los primeros 64 valores de cada instante de tiempo no se cargan, ya que pertenecen a la fila -1. También entre barrido y barrido, en un mismo paso de tiempo hay tres valores que son erróneos, uno de ellos es el 60+1 de las columnas, otro es el encabezado de cambio de barrido y el último es el valor -1 de la columna del siguiente barrido.

% Una vez hecho un paso de tiempo, incrementamos el contador n_ts, para que salte al siguiente paso de tiempo. Cada paso de tiempo tiene una longitud de líneas de 18725.

```
for t=0:0.005:0.5-0.005
```

```
    for n=1:1:300
```

```
        if n==1
```

```
            A=EPG(64+n_ts*18725:123+n_ts*18725,4);
```

```
            B= ROP_S1 (64+n_ts*18725:123+n_ts*18725,4);
```

```
            m=126+n_ts*18725;
```

```
            C(300,:)=A(:)';
```

```
            D(300,:)=B(:)';
```

```
        end
```

```
        if n>1
```

```
            A= EPG (m:m+59,4);
```

```
            B= ROP_S1 (m:m+59,4);
```

```
            m=m+59+3;
```

```
            C(301-n,:)=A(:)';
```

```
            D(301-n,:)=B(:)';
```

```
        end
```

```
    end
```

```
        n_ts=n_ts+1;
```

% Dividimos los valores obtenidos de la densidad relativa entre la densidad para obtener valores entre 0-1

```
        D=D/density_1;
```

%Calculamos la fracción de sólido 2;

$$E=1-C-D$$

%Calculamos el IM de Lacey;

$$CM=\text{mean2}(D);$$

$$\text{sigma}=\text{std2}(D);$$

$$\text{sigma}=\text{sigma}*\text{sigma};$$

$$\text{sigma0}=CM.*(1-CM);$$

% nn = media de partículas que pueden caber en una celda

$$dp=0.5;$$

$$nn=5*5*0.6/(\pi*(dp/2)^2);$$

$$nn=\text{round}(nn);$$

$$\text{sigmaR}=CM.*(1-CM)/nn;$$

$$\text{IML}(k)=(\text{sigma0}-\text{sigma})/(\text{sigma0}-\text{sigmaR});$$

%Calculamos el resto de condiciones de índices de mezclado. Se considera mezclo cuando la fracción de vacío sea menor que uno y la fracción del solido 2 sea igual a la fracción de solido dos multiplicada por un tolerancia.

$$\text{NValid1}=\text{find}((C<1).*(E>0).*(E>(0.8*D)).*(E<(1.2*D)));$$

$$I1=\text{length}(\text{valid3});$$

$$\text{NValid2}=\text{find}((C<1).*(E>0).*(E>(0.9*D)).*(E<(1.1*D)));$$

$$I2=\text{length}(\text{valid1});$$

$$\text{NValid3}=\text{find}((C<1).*(E>0).*(E>(0.95*D)).*(E<(1.05*D)));$$

$$I3=\text{length}(\text{valid2});$$

% Dividimos por el número de celdas iniciales

$$\text{IM1}(k)=I1/(60*60);$$

$$\text{IM2}(k)=I2/(60*60);$$

$$\text{IM3}(k)=I3/(60*60);$$

$$k=k+1;$$

end

end

% Por último mostramos por pantalla la evolución de los índices de mezclado para las tres condiciones definidas.

x= 0:0.005:(k-1)*0.005;

plot(x,IM,'r',x,IM2,'y',x,IM3,'g')

BIBLIOGRAFÍA

- [1] D. Kunii y O. Levenspiel, *Fluidization Engineering*, Butterworth-Heinemann, 1991.
- [2] F. Suárez Gomez, F. Hernández Jiménez, J. Sánchez Prieto, «Estudio experimental del mezclado en un lecho fluidizado bidimensional», Proyecto Final de Carrera, Universidad Carlos III de Madrid, 2014.
- [3] Kuipers, N. J. M., Stamhuis E. J., Beenackers, A. A. C. M., Fluidization of potato starch in a stirred vibrating uidized bed. *Chem. Eng. Sci.* 51: 2727-2732. 1996.
- [4] Cano-Pleite, E., Hern_andez-Jim_enez, F., de Vega, M., Acosta-Iborra, A., Experimental study on the motion of isolated bubbles in a vertically vibrated fluidized bed. *Chem. Eng. J.* 2014.
- [5] D. Geldart, «Types of gas fluidization,» *Powder Technol.*, vol. 7, pp. 285-292, 1973
- [6] S. Ergun, «Fluid flow through packed column,» *Chem. Eng. Prog.*, vol. 48, pp. 89-94, 1952.
- [7] P. Lacey, «Developments in the theory of particile mixing,» *J. appl. Chem*, pp. 257-268, 1954.
- [8] M.Rhodes, «Introduction to Particle Technology», pp. 293-311, 2008.
- [9] Wen-Ching Yang., « Handbook of fluidization and Fluid-Particle System edited», pp. 52-111, 2003
- [10] S. Chiba et al, *Powder Technol*, **26**, 1 (1980); A.W. Nienow and T. Chiba, in *Fluidization*, 2nd ed., J.F. Davidson et l., eds., p. 357, Academic Press, New York, 1985.
- [11] P.N. Rowe, A.W. Nienow, and A.J. Agbim, *Trans. Inst. Chem. Eng.*, **50**, 310, 324 (1972); L.G Gibilaro and P.N. Rowe, *Chem. Eng. Sci.*, **29**, 1403 (1974)
- [12] P.N. Rowe and A.W. Nienow, *Powder Technol*, 15, 141 (1976); A.W. Nienow, P.N. Rowe, and L.Y.L. Cheung, in *Fluidization*, J.F. Davidson and D.L. Keairns, eds., p. 146, Cambridge Univ. Press, New York, 1978.
- [13] A.W. Nienow and N.S. Naimer, *Trans. Inst. Chem. Eng.*, 58, 181 (1980); A.W. Nienow, N.S. Naimer, and T. Chiba, in *Proc. 3rd World Cong. Chem. Eng.*, Tokyo, 1986.
- [14] A.W. Nienow, P.N. Rowe, and T. Chiba, *AIChE Symp. Ser.*, **74(176)**, 45 (1978); T. Chiba, S. Chiba, and A.W. Nienow, in *Fluidization V*, K. **Ostergaard** and A. SØrensen, eds., p. 185, Engineering Foundation, New York, 1986.
- [15] T. Chiba and H. Kobayashi, in *Fluidization and Its Applications*, p. 468, Cepadues, Toulouse, 1973; / . *Chem. Eng. Japan*, **10**, 206 (1977).

- [16] S. Chiba et al., *Powder Technol*, **22**, 255 (1979); H. Tanimoto et al., in *Fluidization III*, J.R. Grace and J.M. Matsen, eds., p. 381, Plenum, New York, 1986.
- [17] T. Chiba et al., in *Fluidization Science and Technology*, M. Kwauk and D. Kunii, eds., pp. 69, 79, Science Press, Beijing, 1982; in *Fluidization V*, K. **Ostergaard** and A. Sørensen, eds., p. 185, Engineering Foundation, New York, 1986.
- [18] Almahdi Atteya. Alhwaige, Siti Masrinda Tasirin, Ahmad Mokhtar Sowedan, Wan Ramli Wan Daud; «Study The Homogeneity of Mixing a Binary Polyethylene Granular Mixture in Fluidised Bed Mixer», 2008.
- [19] F. Hernández-Jiménez, «Numerical and experimental investigations on pseudo-2D gas fluidized beds» Ph.D. dissertation, 2013
- [20] Zhi-Gang Feng, Samuel Gem Musong, Direct Numerical Simulation of Heat and Mass Transfer of Spheres in a Fluidized Bed. Powder Technology, 2014
- [21] Sarnavi, H. J., Noor-Mohammadi, A., Modares-Motlagh, A., Rahmani- Didar, A., DEM Model of Wheat Grains in Storage Considering the Effect of Moisture Content in Direct Shear Test. Research J. of Applied Sci., Eng. And Technol. 5(3): 829-841. 2013.
- [22] Van Wachem, B. G. M., Almstedt, A. E., Methods for multiphase computational fluid dynamics. Chem. Eng. J. 96: 81-98. 2003.
- [23] Briongos., J. V., Sanchez-Delgado, S., Acosta-Iborra, A., Santana, D., A novel approach for modelling bubbling gas-solid fluidized beds. AIChE Journal. 57,7: 1733-1750. 2011
- [24] Li T., Grace J.R., Bi X., Study of wall boundary condition in numerical simulations of bubbling fluidized beds, Powder Technol., 203: 447–457. 2010.
- [25] Gidaspow, D., Bezburuah, R., Ding, J., Hydrodynamics of circulating fluidized beds, kinetic theory approach. Fluidization VII, Proceedings of the 7th Engineering Foundation Conference on Fluidization. 75-82. 1992.